

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования
«**ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ**»

Ю.И. Тюрин, И.П. Чернов, Ю.Ю. Крючков

ФИЗИКА

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

*Допущено Научно-методическим Советом по физике
Министерства образования и науки
Российской Федерации в качестве учебника
для студентов высших учебных заведений, обучающихся
по техническим направлениям подготовки и специальностям*

Издательство
Томского политехнического университета
2009

УДК 530.145.6(075.8)

ББК 22.31я73

Т98

Тюрин Ю.И.

Т98 Физика. Квантовая физика: учебник / Ю.И. Тюрин, И.П. Чернов, Ю.Ю. Крючков; Томский политехнический университет. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2009. – 320 с.
ISBN 5-98298-457-4

Учебник посвящен физике квантовых процессов, содержит многочисленные примеры, упражнения и задачи. Основное внимание уделено раскрытию физического смысла квантовой оптики, квантово-механическому описанию свойств атомов, современным представлениям физики конденсированного состояния. Классический по построению и содержанию курс имеет целью выработать у студентов практические навыки использования фундаментальных физических закономерностей для решения профессиональных задач.

Учебник разработан в рамках реализации Инновационной образовательной программы ТПУ по направлению «Технологии водородной энергетики, энергосбережение и возобновляемые источники энергии» и предназначен для преподавателей, студентов, бакалавров, магистров, обучающихся в технических университетах.

УДК 530.145.6(075.8)

ББК 22.31я73

Рецензенты

Доктор физико-математических наук, профессор ТГПУ

В.И. Шишковский

Доктор физико-математических наук, профессор,
зав. кафедрой прикладной и теоретической физики НГТУ

В.Г. Дубровский

Академик РАН

главный научный сотрудник Института теплофизики СО РАН

В.Е. Накоряков

ISBN 5-98298-457-4

© ГОУ ВПО «Томский политехнический университет», 2009

© Тюрин Ю.И., Чернов И.П., Крючков Ю.Ю., 2009

© Оформление. Издательство Томского политехнического университета, 2009

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	6
1. РАЗВИТИЕ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ	8
2. КОРПУСКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА СВЕТА И ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА	15
2.1. Классическая и квантовая физика	15
2.2. Корпускулярно-волновой дуализм света	16
2.3. Тепловое излучение	18
2.4. Классическая теория теплового излучения. Ультрафиолетовая катастрофа	27
2.5. Гипотеза о квантах. Формула Планка	34
2.6. Тепловое излучение Вселенной	38
2.7. Фотоэффект	42
2.8. Эффект Комптона	46
2.9. Корпускулярно-волновой дуализм	51
2.10. Волновая функция	54
2.11. Дифракция электронов	59
2.12. Опыты с нейтронами и пучками частиц	69
Основные выводы	72
Упражнения	75
Задачи	76
3. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА	78
3.1. Волновые пакеты	78
3.2. Соотношение неопределенностей	82
3.3. Скорость волновых пакетов	93
3.4. Расплывание волнового пакета	94
3.5. Частица в ящике	97
3.6. Уравнение Шрёдингера	103
3.7. Граничные условия	109
3.7.1. Потенциальная яма конечной глубины	109
3.7.2. Потенциальный барьер (туннельный эффект)	116
3.8. Гармонический осциллятор	120
3.9. Оптика и квантовые свойства света	123
3.9.1. Законы геометрической оптики	126
3.9.2. Регистрация фотонов (эффект Ханбэри–Брауна–Твисса)	133
3.9.3. Дифракция света	134
3.10. Квантовый компьютер	137

Основные выводы	151
Упражнения	152
Задачи	153
4. КВАНТОВАЯ ФИЗИКА АТОМА	155
4.1. Приближённая теория атома водорода	155
4.2. Уравнение Шрёдингера в трёх измерениях	157
4.3. Строгая теория атома водорода	160
4.4. Орбитальный момент импульса	163
4.4.1. Проекция момента количества движения	163
4.4.2. Квадрат момента количества движения	165
4.4.3. Нормировка волновых функций	169
4.4.4. Среднее значение	170
4.5. Испускание фотонов	171
4.5.1. Спонтанное излучение	171
4.5.2. Спектр атома водорода	172
4.5.3. Поглощение	174
4.6. Вынужденное излучение	174
4.7. Лазер	180
4.8. Модель атома Бора	186
4.9. Стабильность орбит	191
Основные выводы	192
Упражнения	193
Задачи	195
5. АТОМНАЯ ФИЗИКА	197
5.1. Принцип запрета Паули	197
5.2. Многоэлектронные атомы	198
5.3. Периодическая система элементов	203
5.4. Рентгеновское излучение	208
5.5. Связь в молекулах	209
5.6. Гибридизация	212
Основные выводы	215
Упражнения	216
Задачи	216
6. КОНДЕНСИРОВАННЫЕ СРЕДЫ	218
6.1. Введение	218
6.2. Типы связи	219
6.3. Теория свободных электронов в металлах	222
6.4. Зонная теория твёрдых тел	226
6.5. Физика полупроводников	231
6.6. Сверхтекучесть	244
6.7. Квантовые полупроводниковые структуры в электронике	246
6.8. Лазеры на квантовых ямах	253
6.9. Электронная эмиссия	256
6.9.1. Автоэлектронная эмиссия	257
6.10. Лазерная запись информации	261

6.10.1. Цифровая запись информации	262
6.10.2. Принцип записи и хранения информации на CD	262
6.10.3. Формирование записывающего лазерного излучения	265
6.10.4. Среды для записи	265
6.10.5. Плотность записи	267
6.10.6. Устройство считывающей головки CD-привода	269
6.10.7. Однослойные DVD	271
6.10.8. FMD-диски	272
6.10.9. Способы лазерной записи	273
6.11. Современные оптические системы отображения информации	276
6.11.1. Принцип действия мультимедийных проекторов	276
6.11.2. Принципы работы цифровых печатающих устройств	285
6.12. Наноматериалы и нанотехнологии	288
Основные выводы	316
Упражнения	317
Задачи	318

ПРЕДИСЛОВИЕ

Существует потребность в курсе лекций по физике для технических университетов, который бы сочетал разумную глубину и академичность изложения наряду с широтой и практической направленностью включенного в него материала. Выпускник технического университета обязан профессионально владеть одной из основных фундаментальных дисциплин — физикой — и твердо усвоить принципы и подходы естественных наук, обеспечившие ускоренное продвижение человечества по пути прогресса на протяжении многих веков.

Успешное применение фундаментальных физических принципов, воспитание уверенности в незыблемости физических законов, в пределах выполнения условий их применимости, понимание преемственности и естественности развития физической науки происходят в процессе творческого развития у студентов практических навыков. Формирование и закрепление практических навыков возможно при пояснении на разнообразных примерах наиболее сложных физических понятий, самостоятельном разборе упражнений и решении задач, ясных по своей постановке, актуальных по значению и вместе с тем имеющих далеко не очевидные решения. Физика является профессиональным рабочим инструментом в руках инженера. Использование физики в повседневной практической деятельности не только не должно пугать выпускника технического университета, но напротив, должно доставлять ему эстетическую и профессиональную радость творчества и сознание собственной значимости и состоятельности. Достижение этой цели предполагает продолжительный, нелегкий и вдумчивый путь познания. На этом пути студент не только учится ориентироваться в современном мире, но и вырабатывает навык получения новых научных результатов, решения практических проблем и формирует уверенную позицию по отношению к псевдонаучным откровениям.

Решение поставленных проблем в курсе лекций для технических университетов возможно, на наш взгляд, при использовании в нем лучших достижений и находок замечательных учебников по физике рос-

сийских, советских и зарубежных ученых и педагогов, с учетом многолетнего личного опыта преподавания физики и активной творческой научно-практической работы в техническом университете.

При написании данного курса физики мы старались использовать интересные научно-методические результаты известных авторов: Д.В. Сивухина, А.Н. Матвеева, И.В. Савельева, Р. Фейнмана, Дж. Орира, К.А. Путилова, Л.Д. Ландау, Я.Б. Зельдовича и других. Нашей целью была не «патентная чистота» и новизна курса, а его повседневная практическая польза и удобство для преподавателя и студента, возможность выбора для преподавателя и студента в рамках одного учебника различных траекторий обучения в техническом университете. Нам хотелось совместить в учебнике разумную фундаментальность подходов с выработкой практических навыков использования физической теории для решения научно-исследовательских, инженерно-технических и мировоззренческих задач современного мира. По мере возможности мы старались показать ясность и даже очевидность многих физических результатов, но стремились не загромождать пути движения к физически верному результату безукоризненностью терминологии и отточенностью методологии. Это на наш взгляд отличает живую научную дисциплину от начетничества, живую науку – физику от канонизированного подхода. Вначале студент должен понять, о чем идет речь, а затем придет время и строгого доказательного изложения.

Авторы признательны В.М. Толмачеву, взявшему на себя огромный труд по научно-методическому редактированию рукописи, и с пониманием и благодарностью воспримут замечания и предложения, способствующие улучшению курса.

1. РАЗВИТИЕ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ

Наступление новой эпохи в физике было подготовлено открытием электрона Дж.Дж. Томсоном (*J.J. Thomson*) в конце XIX в. Выяснилось, что атомы не элементарны, а представляют собой сложные системы, в состав которых входят электроны.

Представление о существовании кванта действия h зародилось в рамках статистической теории равновесного теплового излучения ($h = 6,626176 \cdot 10^{-34}$ Дж·с). В конце XIX в. выяснилось, что распределение энергии теплового излучения по спектру, выведенное из закона классической статистической физики о равномерном распределении энергии по степеням свободы, противоречит опыту. Из теории следовало, что вещество должно излучать электромагнитные волны при любой температуре, терять энергию и охлаждаться до абсолютного нуля, т. е. тепловое равновесие между веществом и излучением невозможно. Однако повседневный опыт противоречил этому выводу.

Выход был найден в 1900 г. Максом Планком (*M. Planck*), показавшим, что результаты теории согласуются с опытом, если предположить, в противоречии с классической электродинамикой, что атомы испускают электромагнитную энергию отдельными порциями — квантами. Энергия каждого такого кванта прямо пропорциональна частоте, а коэффициентом пропорциональности является квант действия h , получивший впоследствии название постоянной Планка.

В 1905 г. Альберт Эйнштейн расширил гипотезу Планка, предположив, что излучаемая порция электромагнитной энергии сохраняет свою индивидуальность — распространяется и поглощается только целиком, т. е. ведет себя подобно частице (позднее она была названа фотоном). На основе этой гипотезы Эйнштейн объяснил закономерности фотоэффекта, не укладывающиеся в рамки классической электродинамики.

Таким образом, на новом качественном уровне была возрождена корпускулярная теория света. Свет ведет себя подобно потоку частиц (корпускул), однако одновременно ему присущи и волновые свойства, которые проявляются, в частности, в явлениях дифракции и интерферен-

ции. Следовательно, несовместимые с точки зрения классической физики волновые и корпускулярные свойства в равной мере присущи свету.

Квантование излучения приводило к заключению, что энергия внутриатомных движений также может меняться только скачкообразно. Такой вывод был сделан Нильсом Бором (*N. Bhor*) в 1913 г. К этому времени Эрнест Резерфорд (*E. Rutherford*, 1911), интерпретируя результаты своих экспериментов по рассеянию α -частиц веществом, открыл атомное ядро и предложил ядерную (планетарную) модель атома. В атоме Резерфорда движение электронов вокруг ядра подобно движению планет вокруг Солнца. Однако, согласно электродинамике Максвелла, такой атом неустойчив: электроны, двигаясь по круговым (или эллиптическим) орбитам, испытывают ускорение, а следовательно, должны непрерывно излучать энергию и, в конце концов, за время $\sim 10^{-8}$ с упасть на ядро. Чтобы объяснить устойчивость атома и его линейчатый спектр, Бор постулировал, что атомы могут находиться лишь в особых стационарных состояниях, в которых электроны не излучают, и только при переходе из одного стационарного состояния в другое атом испускает или поглощает энергию. Дискретность энергии атома была подтверждена в 1913–1914 гг. опытами Дж. Франка (*J. Franck*) и Г. Герца (*G. Gertz*) по изучению столкновений с атомами электронов, ускоренных электрическим полем. Для простейшего атома — атома водорода — Бор построил количественную теорию спектра, согласующуюся с опытом. Однако теория Бора была внутренне противоречива: используя для движения электронов законы механики Ньютона, она в то же время искусственно накладывала на возможные движения электронов чуждые классической физике квантовые ограничения.

Дискретность действия — фундаментальный факт, требующий радикальной перестройки как законов механики, так и законов электродинамики. Постоянная Планка — универсальная мировая константа, определяющая масштаб квантовых явлений. Классические законы справедливы лишь при рассмотрении движения объектов достаточно большой массы, когда величины размерности действия велики по сравнению с h (дискретностью действия можно пренебречь и считать $h = 0$).

В 1920-х гг. была построена последовательная, логически завершенная теория движения микрочастиц — квантовая, или волновая, механика — самая глубокая из современных физических теорий. В ее основу легли идея квантования Планка–Бора и выдвинутая в 1924 г. Луи де Бройлем (*L. de Broglie*) гипотеза, что двойственная корпускулярно-волновая природа свойственна не только электромагнитному излучению (фотонам), но и

любым другим видам материи. Все микрочастицы (электроны, протоны, атомы и т. д.) обладают не только корпускулярными, но и волновыми свойствами: каждой из них можно поставить в соответствие волну, длина которой равна отношению постоянной Планка h к импульсу частицы, а частота — отношению энергии к h . Волны де Бройля описывают свободные частицы. В 1927 г. впервые наблюдалась дифракция электронов, экспериментально подтвердившая наличие у них волновых свойств. Позднее дифракция наблюдалась и у других микрочастиц, включая молекулы.

В 1926 г. Эрвин Шредингер (*E. Schrödinger*), пытаясь получить дискретные значения энергии в атоме из уравнения волнового типа, сформулировал основное уравнение нерелятивистской квантовой механики, названное его именем. Вернер Гейзенберг (*W. Heisenberg*) и другие построили квантовую механику в другой математической форме — так называемую, матричную механику.

В 1925 г. Дж.Ю. Уленбек (*J.J. Uhlenbeck*) и С.А. Гаудсмит (*S.A. Goudsmit*) на основании экспериментальных (спектроскопических) данных открыли существование у электрона собственного момента количества движения — спина (а следовательно, и связанного с ним спинного, магнитного момента). Вольфганг Паули (*W. Pauli*) записал уравнение движения нерелятивистского электрона во внешнем электромагнитном поле с учетом взаимодействия магнитного момента электрона с магнитным полем (уравнение Паули). В 1925 г. Паули сформулировал также, так называемый, принцип запрета, согласно которому в одном квантовом состоянии не может находиться больше одного электрона (принцип Паули). Этот принцип сыграл важнейшую роль в построении квантовой теории систем многих частиц. В частности, он позволил объяснить закономерности заполнения электронами оболочек и слоев в многоэлектронных атомах и, таким образом, дал теоретическое обоснование периодической системы элементов Менделеева.

Открытие Резерфордом атомного ядра предшествовали открытия радиоактивности, радиоактивных превращений тяжелых атомов [А. Беккерель (*H. Becquerel*), П. и М. Кюри (*P. u M. Curi*)], а также изотопов [Ф. Содди (*F. Soddy*)]. Первые попытки непосредственного исследования строения атомного ядра относятся к 1919 г., когда Резерфорд, облучая стабильные ядра азота α -частицами, установил превращение их в ядра кислорода. Открытие Дж. Чедвиком (*J. Chadwick*) нейтрона (1932) привело к созданию современной протонно-нейтронной модели ядра (Гейзенберг, Д. Д. Иваненко). В 1934 г. Ф. и И. Жолио-Кюри (*F. и I. Joliot-Curi*) открыли искусственную радиоактивность.

Одновременно с физикой атомного ядра началось быстрое развитие физики элементарных частиц. Обнаруженная универсальная взаимопревращаемость элементарных частиц указывала на то, что не все эти частицы элементарны в абсолютном смысле этого слова, а имеют сложную внутреннюю структуру. Экспериментально открыты 12 элементарных фермионов (со спином $s = 1/2$) и 4 бозона (со спином $s = 1$), не считая соответствующих античастиц. Двенадцать фермионов делятся на 3 поколения, в каждом из которых 2 лептона и 2 кварка.

Названия и обозначения кварков (М. Гелл-Манн и Г. Цвейг, 1964) происходят от английских слов: u — *up*, d — *down*, s — *strangeness*, c — *charm*, b — *bottom* (также *beauty*), t — *top* (также *truth*). Кварки имеют дробный электрический заряд и служат элементарными составляющими сильно взаимодействующих частиц. По современным представлениям, кварки бесструктурны.

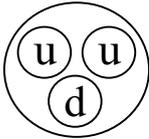
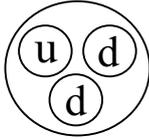
У каждого заряженного фермиона есть своя античастица: \bar{u} , \bar{d} , \bar{s} , \bar{c} , \bar{b} , \bar{t} , e^+ , μ^+ , τ^+ . Есть ли античастицы у нейтрино, пока неизвестно. Возможно, что они (по крайней мере, некоторые из них) истинно нейтральны, т. е. являются своими собственными античастицами. Такие истинно нейтральные нейтрино называют майорановыми, в отличие от обычных, которые называют дираковскими. В настоящее время установлено, что все нейтрино майорановы и их масса отлична от нуля. Имеющиеся данные ограничивают массу всех нейтрино значением 2...3 эВ. Это верхний предел, возможно, массы значительно меньше.

Несомненным достижением современной физики являются ясные представления об иерархической структуре устойчивого вещества от простейших фундаментальных частиц до Вселенной. Устойчивое вещество построено всего из трех фундаментальных частиц: двух кварков — u , d и электрона e .

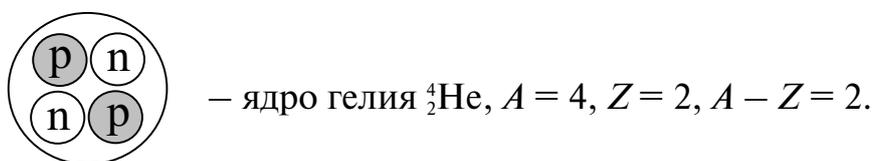
Первая ступень иерархической структуры вещества — фундаментальные частицы:

	\textcircled{u}	\textcircled{d}	\textcircled{e}
Название	u-кварк	d-кварк	электрон
Электрический заряд в единицах $ e $	+2/3	-1/3	-1

Вторая ступень иерархической структуры вещества — частицы, состоящие из кварков, в частности нуклоны:

		
Название	p = uud – протон	n = udd – нейтрон
Электрический заряд в единицах e	+1	0

Третья ступень иерархической структуры вещества – ядра – состоят из нуклонов: нейтронов и протонов. Например, ядро гелия ${}^4_2\text{He}$ или ядро кислорода ${}^{16}_8\text{O}$. Верхний индекс A – число нуклонов, нижний индекс Z – число протонов, $(A - Z)$ – число нейтронов.

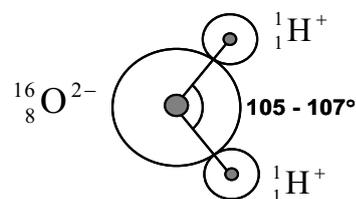


Четвертая ступень иерархической структуры вещества – атомы. Состоят из ядер и электронов.



Верхний правый индекс дает суммарный заряд атома Q_a . Разность $(Z - Q_a)$ – число электронов в атоме (ионе). Например, ${}^4_2\text{He}^{1+}$ содержит $(Z - Q_a) = 2 - 1 = 1$ электрон – это однозарядный ион гелия. Ион кислорода ${}^{16}_8\text{O}^{2-}$ содержит $(Z - Q_a) = 8 - (-2) = 10$ электронов.

Пятая ступень иерархической структуры вещества – молекулы. Состоят из атомов. Пример: молекула воды H_2O .



Шестая ступень иерархической структуры вещества – газы. Состоят из молекул, в том числе одноатомных. Пример: земная атмосфера состоит из молекул N_2 , O_2 , H_2O и других.

Седьмая ступень иерархической структуры – конденсированные вещества. К ним относятся жидкости и твердые тела, которые являются плотными упаковками молекул. Например, вода –

плотная упаковка молекул H_2O . Медь — плотная упаковка одноатомных молекул или просто атомов Cu . Конденсированные вещества бывают двух главных типов — упорядоченные и неупорядоченные. Упорядоченные вещества называют кристаллами. Бывают жидкие и твердые кристаллы. В кристаллах ядра атомов и молекул расположены в строгом геометрическом порядке, который распространяется по всему объему. В неупорядоченных веществах такого дальнего порядка в расположении ядер атомов нет. Например, из молекул SiO_2 — двуокиси кремния — состоит кристалл кварца (упорядоченное вещество) и кварцевое стекло (неупорядоченное вещество). Вода — неупорядоченное жидкое вещество. Но есть жидкие кристаллы. Некоторые из них широко используют в жидкокристаллических экранах: мониторах компьютеров, телевизоров и т. д.

В качестве примера рассмотрим структуру кристалла кремния Si , который является абсолютным рекордсменом среди материалов по масштабам применения в микроэлектронике.



Элементарная ячейка кристалла Si представляет собой тетраэдр, все четыре грани которого — правильные треугольники. В вершинах тетраэдра и в его центре расположено по одному атому Si . Таким образом, центральный атом имеет четыре ближайших соседа, с которыми устанавливает ковалентную химическую связь путем обмена электронами.

Восьмая ступень иерархической структуры вещества — объекты астрофизики. К ним относятся метеориты, астероиды, планеты, звезды, галактики, скопления галактик и другие.

Таковы восемь основных ступеней иерархической структуры вещества. Они кратко перечисляются в итоговой табл. 1.1 с названием разделов квантовой физики, в которых изучаются основные закономерности взаимодействий на данной структурной ступени материи.

Таблица 1.1

Иерархическая структура устойчивого вещества

Степень иерархии и объекты исследований	Раздел квантовой физики
1. Фундаментальные частицы: кварки и электрон (u-кварк, d-кварк, e-электрон)	Квантовая хромодинамика
2. Элементарные частицы, состоящие из кварков – нуклоны: протон $p = uud$, нейтрон $n = udd$	Физика элементарных частиц
3. Ядра атомов: A – число нуклонов, Z – протонов, $(A - Z)$ – нейтронов: ${}^4_2\text{He}$, ${}^{12}_6\text{C}$, ${}^{238}_{92}\text{U}$ и т. д.	Квантовая механика, квантовая электродинамика
4. Атомы (ионы): ядро плюс электроны: ${}^4_2\text{He}^0$, ${}^4_2\text{He}^{1+}$, ${}^{16}_8\text{O}^{2-}$ и т. д.	Квантовая физика атома, квантовая оптика и электроника
5. Молекулы состоят из атомов: N_2 , O_2 , H_2O , CO_2 и т. д.	Квантовая механика, квантовая теория многих тел
6. Газ молекул. Атмосфера	Квантовая химия
7. Конденсированные вещества – жидкости и твердые тела: вода, жидкие кристаллы, металлы, полупроводники	Квантовые жидкости, квантовая физика твердого тела
8. Объекты астрофизики: планеты, звезды, галактики и т. д.	Релятивистская астрофизика

2. КОРПУСКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА СВЕТА И ВОЛНОВЫЕ СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВА

2.1. Классическая и квантовая физика

Физические явления и описывающие их законы принято разделять на классические и квантовые. Современная физика опирается на возникшее в конце 20-х гг. XX в. представление о том, что свету, наряду с волновыми свойствами, присущи и свойства частиц – фотонов. С квантовой природой света связана новая фундаментальная физическая постоянная, открытая Планком в 1900 г. Чтобы объяснить спектр излучения нагретых тел, Планк предположил, что осцилляторы могут излучать свет лишь порциями – квантами с энергией $E = h\nu$, где ν – частота осциллятора, а h – постоянная Планка.

Установлено, что всем элементарным частицам присущи волновые свойства, которые значительно влияют на их поведение, особенно на небольших расстояниях. Не принимая во внимание квантовые свойства вещества, невозможно разобраться ни в строении атомов и молекул, ни в свойствах элементарных частиц, ни в таких разделах физики, как ядерная физика, астрофизика и физика твердого тела. Из представлений о квантовой природе вещества следуют основные положения и математический формализм квантовой механики.

С помощью законов Ньютона удалось объяснить законы падения тел, полет снарядов, движение искусственных спутников Земли, движение планет и другие случаи макроскопического движения. Кроме того, ньютоновская механика дала нам законы сохранения энергии, импульса и момента импульса.

Согласно представлениям химиков XIX в., вещество состоит из молекул и атомов. Эти представления вместе с законами Ньютона легли в основу кинетической теории тепла, которая раскрыла понятие тепла. Почти полтора века тому назад, используя понятие заряда и основ-

ные законы теории электричества, Максвелл дал объяснение многообразным электрическим и магнитным явлениям. Вершиной достижений классической физики стала созданная Максвеллом в 1870 г. электродинамика, раскрывшая природу света. Возникновение трудностей в теории эфира связано с отрицательными результатами опыта Майкельсона—Морли — попыткой обнаружить среду, ответственную за перенос электромагнитных волн, и зависимость скорости света от скорости движения источника и наблюдателя. Это послужило поводом к созданию в 1905 г. специальной теории относительности. Со временем уравнения Максвелла стали рассматриваться как релятивистское следствие закона Кулона.

Квантовая природа вещества качественно проявляется в том, что каждой частице присущи свойства волны и, наоборот, любые волны имеют свойства, характерные для частиц. Примером, демонстрирующим это свойство, является фотоэффект, квантовую теорию которого Эйнштейн разработал в 1905 г.

2.2. Корпускулярно-волновой дуализм света

В конце XIX столетия казалось, что ответ на вопрос о природе света найден и доказан экспериментально: свет есть распространяющиеся в пространстве электромагнитные волны. Волновая теория света объяснила явления интерференции, дифракции, поляризации и др.

Однако уже в начале XX в. при исследовании теплового излучения и взаимодействия света с веществом были обнаружены такие оптические явления, как фотоэффект, эффект Комптона, фотохимические реакции и др. Объяснение этих явлений на основе волновых представлений о природе света оказалось несостоятельным. Предсказания волновой теории света пришли в противоречие с наблюдаемыми в экспериментах закономерностями оптических явлений (линейчатый спектр излучения атомов и молекул, распределение плотности энергии в спектре теплового излучения и т. д.). В 1905 г. Эйнштейн выдвинул корпускулярную теорию света, которая, развивая идеи Ньютона о световых corpusculis, рассматривала свет как поток большого числа частиц, названных фотонами. Фотонная теория света легко объяснила все качественные и количественные закономерности явлений квантовой оптики.

Вместе с тем оказалось несостоятельным простое механическое объединение свойств волн и частиц в одном физическом объекте.

Световая волна представляет собой нелокализованное электромагнитное поле, распределенное по пространству. Объемная плотность энергии электромагнитного поля волны пропорциональна квадрату ее амплитуды и может изменяться непрерывно.

В отличие от волны, фотон как световая частица в данный момент времени локализован вблизи некоторой точки и со временем перемещается в пространстве. Световая энергия в такой модели изменяется дискретно, оставаясь кратной минимальной порции (кванту) энергии, которую несет одиночный фотон.

Свет есть материальный, квантовый объект, обладающий как волновыми, так и корпускулярными свойствами. В различных физических процессах эти свойства могут проявляться в различной степени. В явлениях интерференции, дифракции, поляризации свет проявляет волновые свойства. В этих случаях следует рассматривать свет как электромагнитные волны. В других оптических явлениях свет проявляет свои корпускулярные свойства и тогда его следует представлять как поток фотонов. Оптический эксперимент можно организовать и таким образом, что свет проявит в нем как волновые, так и корпускулярные свойства. Например, в опыте Комптона свет ведет себя как поток фотонов, но в измерительном блоке это же излучение испытывает дифракцию на кристаллической решетке.

Существуют оптические явления, которые могут быть объяснены качественно и количественно как волновой, так и корпускулярной теориями света. Так, например, обе эти теории приводят к одинаковым соотношениям для давления, оказываемого светом при падении его на вещество. Это объясняется тем, что любая модель – и волновая, и корпускулярная – учитывает наличие у света таких материальных характеристик, как энергия, масса, импульс.

Свет обладает двойственной природой, получившей название корпускулярно-волнового дуализма света. С некоторыми объектами свет взаимодействует как волна, с другими – подобно потоку частиц. Однако «ни одна из этих картин (корпускулярная или волновая) не может сказать нам всей правды о природе света» – писал английский физик Джеймс Джинс. И хотя эти картины даже противоположны друг другу, одна картина дополняет другую. «Противоположности – не противоречия, а дополнения», – гласит девиз Нильса Бора.

В физике свет оказался первым объектом, у которого была обнаружена двойственная, корпускулярно-волновая природа. Дальнейшее развитие физики значительно расширило класс таких объектов.

2.3. Тепловое излучение

Любое нагретое тело излучает электромагнитные волны. Чем выше температура тела, тем более короткие волны оно испускает. Тело, находящееся в термодинамическом равновесии со своим излучением, называют абсолютно черным (АЧТ). Излучение абсолютно черного тела зависит только от его температуры.

Понятие АЧТ введено в 1859 г. Г.Р. Кирхгофом (*G.R. Kirchhoff*), установившим связь между испускательными и поглощательными способностями тела, находящегося в равновесии с излучением при определенной температуре (см. закон излучения Кирхгофа).

Абсолютно черное тело – понятие теории теплового излучения, означающее тело, которое полностью поглощает любое падающее на его поверхность электромагнитное излучение, независимо от температуры этого тела. Таким образом, для абсолютно черного тела (АЧТ) поглощательная способность (отношение поглощённой энергии к энергии падающего излучения) равна 1 при излучениях всех частот, направлений распространения и поляризации. Плотность энергии и спектральный состав излучения, испускаемого единицей поверхности АЧТ, зависят только от его температуры, но не от природы излучающего вещества. Излучение АЧТ подчиняется закону Планка.

В нагретых телах часть внутренней энергии вещества может превращаться в энергию излучения. Это излучение называют тепловым излучением.

Тепловое излучение (температурное излучение) – электромагнитное излучение, испускаемое веществом и возникающее за счёт его внутренней энергии (в отличие, например, от люминесценции, которая возбуждается внешними источниками энергии). Эксперименты показывают, что тепловое излучение возникает в условиях детального равновесия в веществе и имеет сплошной спектр, положение максимума которого зависит от температуры вещества.

Это означает, что нагретое тело испускает некоторое количество энергии излучения в любом диапазоне частот или длин волн. Распределение энергии излучения тела по спектру зависит от температуры тела. При этом для всех тел с увеличением температуры максимум энергии излучения смещается в коротковолновый участок спектра, а общая энергия излучения возрастает. Так, если излучение батареи центрального отопления ($T \approx 350 \text{ K}$) имеет пик энергии в диапазоне невидимого инфракрасного излучения, то раскаленная поверхность Солнца

($T \approx 6 \cdot 10^3$ К) излучает значительную часть энергии в диапазоне видимого света, а при ядерном взрыве ($T \approx 10^6$ К) большая доля энергии взрыва уносится коротковолновым рентгеновским и гамма-излучением.

Если несколько нагретых излучающих тел окружить идеально отражающей, непроницаемой для излучения оболочкой (рис. 2.1), то по истечении некоторого промежутка времени в системе «излучающие тела + излучение в полости» установится термодинамическое равновесие. Это означает, что температуры всех тел выровняются, а распределение энергии между телами и излучением не будет изменяться со временем. Такое равновесное состояние системы устойчиво. Термодинамическое равновесие установится и в полости, стенки которой выполнены из любого реального материала и поддерживаются при некоторой неизменной температуре.

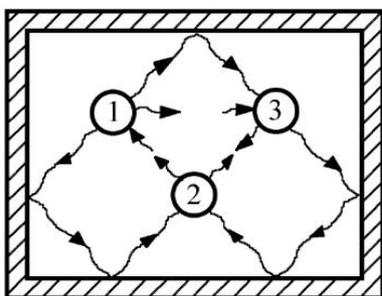


Рис. 2.1. В системе «излучающие тела + излучение в полости» установится термодинамическое равновесие

Способность теплового излучения находиться в равновесии с излучающим телом отличает тепловое излучение от других видов излучения тел. Излучение, находящееся в равновесии с излучающим телом, будем называть равновесным.

Равновесному излучению можно сопоставить температуру тела, с которым оно находится в равновесии, распространив при этом законы равновесной термодинамики на тепловое излучение. Это означает, что для равновесного теплового излучения можно определить и рассчитать внутреннюю энергию, давление, энтропию и другие термодинамические характеристики, которые не будут изменяться со временем.

Равновесное тепловое излучение однородно. Его плотность энергии одинакова во всех точках внутри полости, где оно заключено. Тепловое излучение изотропно и неполяризовано. Оно содержит все возможные направления распространения и направления колебаний векторов **E** и **B**.

Характеристики теплового излучения. Для описания спектрального состава теплового излучения рассмотрим энергию, излучаемую единицей поверхности нагретого тела в единицу времени в

диапазоне частот от ω до $(\omega + d\omega)$. Этот поток лучистой энергии dR , испускаемый с единицы поверхности тела по всем направлениям, пропорционален ширине спектрального диапазона, то есть $dR = r d\omega$. Энергию r , приходящуюся на единичный интервал частот, называют спектральной испускательной способностью тела или спектральной плотностью энергетической светимости.*)

Спектральная испускательная способность является функцией частоты и температуры $r = r(\omega, T)$. Будем использовать принятое в теории теплового излучения обозначение: $r(\omega, T) \equiv r_{\omega, T}$.

Спектральную испускательную способность тела в переменных ω и T можно легко представить в шкале длин волн (λ и T). Преобразование координат нужно производить из условия равенства «мономатических» потоков излучения $d\Phi$, соответствующих интервалам длин волн от λ до $(\lambda + d\lambda)$ и частот от ω до $(\omega + d\omega)$:

$$d\Phi = r_{\lambda, T} d\lambda = r_{\omega, T} d\omega \quad \text{или} \quad r_{\lambda, T} = r_{\omega, T} \frac{d\omega}{d\lambda}.$$

Так как $\omega = 2\pi c/\lambda$, то $\left| \frac{d\omega}{d\lambda} \right| = \frac{2\pi c}{\lambda^2} = \frac{\omega^2}{2\pi c}$, следовательно

$$r_{\lambda, T} = \frac{\omega^2}{2\pi c} \cdot r_{\omega, T} \quad \text{и} \quad r_{\omega, T} = \frac{\lambda^2}{2\pi c} \cdot r_{\lambda, T}.$$

Знак «минус» у производной $d\omega/d\lambda$ опущен. Он лишь показывает, что с возрастанием длины волны λ частота ω убывает. После подстановки в полученные выражения $\omega = 2\pi c/\lambda$, получим спектральную испускательную способность тела в переменных λ и T или ω и T .

Поскольку при переходе от кривой $r_{\omega, T}$ к $r_{\lambda, T}$ используется нелинейное преобразование, то вид кривой трансформируется. При этом длина волны λ_m , на которую приходится максимум функции $r_{\lambda, T}$, и частота $\omega_m = 2\pi\nu_m$, на которую приходится максимум функции $r_{\omega, T}$, соответствуют разным спектральным компонентам: $\lambda_m \nu_m \neq c$. Поэтому не имеет смысла судить о максимуме энергии в спектре по кривой спектрального распределения. Это пример того, как вид спектральных кривых и положение максимумов на них зависят от системы координат, в которых они построены.

*) В литературе не существует единой терминологии в отношении величин, характеризующих тепловое излучение, поэтому в данной книге приводятся наиболее часто встречаемые в публикациях термины.

Суммарный поток энергии излучения с единицы поверхности тела по всему диапазону частот —

$$R = \int_0^{\infty} r_{\omega,T} d\omega$$

— называется интегральной испускательной способностью тела, или его энергетической светимостью. В системе СИ энергетическая светимость измеряется в Вт/м², а спектральная испускательная способность имеет размерность Дж/м² (для $r_{\omega,T}$) и Вт/м³ (для $r_{\lambda,T}$).

Характеристикой процесса поглощения телами излучения служит спектральная поглощательная способность тела $a_{\omega,T}$. Пусть в интервале частот от ω до $(\omega + d\omega)$ на поверхность тела падает поток излучения $d\Phi_{\omega}$. Часть этого потока $d\Phi'_{\omega}$ поглощается телом. Поглощательная способность тела на частоте ω определяется как безразмерная величина:

$$a_{\omega,T} = \frac{d\Phi'_{\omega}}{d\Phi_{\omega}},$$

характеризующая долю поглощенного телом потока излучения.

Спектральная поглощательная способность тела $a_{\omega,T}$ зависит от частоты ω и температуры T .

По определению поглощательная способность тела не может быть больше единицы. При этом тело, у которого поглощательная способность меньше единицы и одинакова по всему диапазону частот, называют серым телом.

Особое место в теории теплового излучения занимает абсолютно черное тело (АЧТ). Так Г. Кирхгоф назвал тело, у которого на всех частотах и при любых температурах поглощательная способность равна единице ($a_{\omega,T} \equiv 1$). Реальное тело всегда отражает часть энергии падающего на него излучения (рис. 2.2). Даже сажа приближается по свойствам к абсолютно черному телу лишь в оптическом диапазоне.

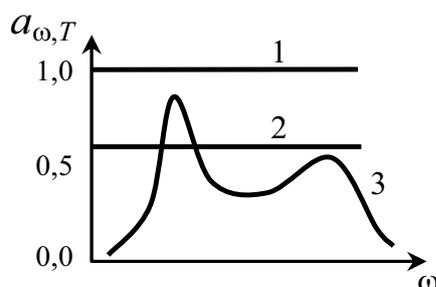


Рис. 2.2. Спектральная поглощательная способность тела:
1 — абсолютно чёрное тело;
2 — серое тело; 3 — реальное тело

Абсолютно черное тело является идеальной моделью в теории теплового излучения. И хотя в природе нет абсолютно черного тела, достаточно просто реализовать модель, для которой поглощательная способность на всех частотах будет пренебрежимо мало отличаться от единицы. Абсолютно черное тело можно представить в виде замкнутой полости (рис. 2.3), снабженной малым отверстием, диаметр которого значительно меньше поперечных размеров полости. Полость может иметь произвольную форму и изготавливаться из любого материала.

Малое отверстие почти полностью поглощает падающее на него излучение. С уменьшением размера отверстия его поглощательная способность стремится к единице. Излучение через отверстие попадает на стенки полости, частично поглощаясь ими. При малых размерах отверстия луч должен претерпеть множество отражений, прежде чем он сможет выйти из отверстия, то есть, формально, отразиться от него. При многократных повторных переотражениях излучение, попавшее в полость, практически полностью поглотится. Внутри полости устанавливается практически полное равновесие излучения с веществом, и плотность энергии выходящего из отверстия излучения очень мало отличается от равновесной. Поэтому малому отверстию и приписывается свойство абсолютно черного тела. Подобные устройства, с высокой точностью моделирующие АЧТ, применяют в качестве световых эталонов, используют при измерениях высоких температур.

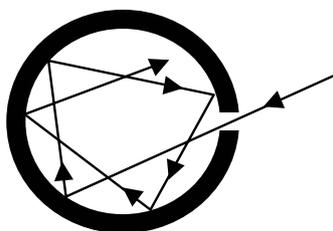


Рис. 2.3. Модель абсолютно чёрного тела: излучение, попадающее на отверстие в полости, практически полностью ею поглощается

Исследуя распределение энергии излучения из малого отверстия в нагретой полости, можно экспериментально определить испускательные способности абсолютно черного тела $r_{\omega, T}$, $r_{\lambda, T}$. Результаты таких экспериментов при различных значениях температуры приведены на рис. 2.4.

Закон Кирхгофа. Между испускательными и поглощательными свойствами любого тела должна существовать связь. В опыте с равновесным тепловым излучением (см. рис. 2.1) равновесие в системе может установиться только в случае, если каждое тело излучает в единицу времени столько же энергии, сколько оно поглощает. Это означает, что

тела, интенсивнее поглощающие излучение какой-либо частоты, будут это излучение интенсивнее и испускать.

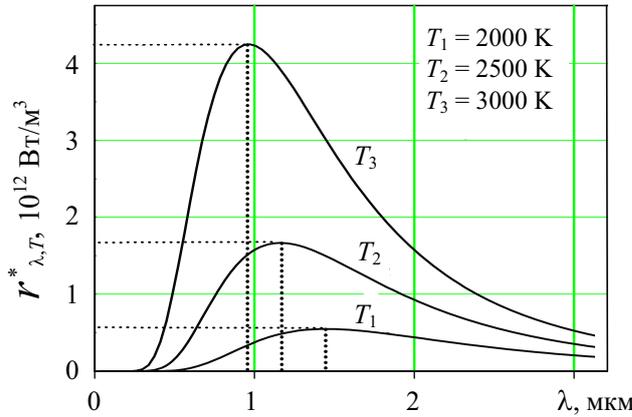


Рис. 2.4. Спектральная испускательная способность абсолютно чёрного тела ($T_3 > T_2 > T_1$)

В соответствии с принципом детального равновесия*) отношение испускательной и поглощательной способностей одинаково для всех тел, включая абсолютно черное тело, и при данной температуре является универсальной функцией частоты (длины волны).

Этот закон теплового излучения – закон Кирхгофа – установлен в 1859 г. Г. Кирхгофом при рассмотрении термодинамических закономерностей равновесных систем с излучением. Закон Кирхгофа можно записать в виде

$$\left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_1 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_2 = \left(\frac{r_{\omega,T}}{a_{\omega,T}} \right)_3 = \dots = \frac{r_{\omega,T}^*}{1} = f(\omega, T)$$

или

$$\left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_1 = \left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_2 = \left(\frac{r_{\lambda,T}}{a_{\lambda,T}} \right)_3 = \dots = \frac{r_{\lambda,T}^*}{1} = \varphi(\lambda, T).$$

Индексы 1, 2, 3, ... соответствуют различным телам, а звездочка (*) относится к АЧТ.

*) Принцип детального равновесия (принцип детального баланса) – общий принцип квантовой механики и статистической физики, согласно которому для изолированной системы вероятность прямого перехода между квантовыми состояниями $n \rightarrow m$ равна вероятности обратного перехода $m \rightarrow n$, то есть $P_{nm} = P_{mn}$. Принцип детального равновесия является следствием основных принципов квантовой механики, в частности симметрии квантовых уравнений движения относительно обращения времени.

Из закона Кирхгофа следует, что универсальные функции $f(\omega, T)$ и $\varphi(\lambda, T)$ есть спектральные испускательные способности $r_{\omega, T}^*$ и $r_{\lambda, T}^*$ абсолютно черного тела по шкале частот и длин волн, соответственно.

В теории теплового излучения характеристики абсолютно черного тела имеют универсальный характер. Реальное тело излучает при любой температуре всегда меньше энергии, чем абсолютно черное тело. Зная испускательную способность абсолютно черного тела (универсальную функцию Кирхгофа) и поглощательную способность реального тела, из закона Кирхгофа можно определить энергию, излучаемую этим телом в любом диапазоне частот или длин волн.

Закон Стефана–Больцмана. Экспериментальные (1879 г. — Й. Стефан) и теоретические (1884 г. — Л. Больцман) исследования позволили установить, что энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени его абсолютной температуры:

$$R^* = \sigma T^4.$$

По современным измерениям постоянная Стефана–Больцмана $\sigma = 5,670400(40) \cdot 10^{-8}$ Вт/(м²К⁴) на 2002 г.

Для реальных тел закон Стефана–Больцмана выполняется лишь качественно, то есть с ростом температуры энергетические светимости всех тел увеличиваются. Для реальных тел зависимость энергетической светимости от температуры имеет вид

$$R = A_T R^* = A_T \sigma T^4.$$

Коэффициент $A_T < 1$ называется интегральной поглощательной способностью тела. Значения A_T , в общем случае зависящие от температуры, известны для многих технически важных материалов. В достаточно широком диапазоне температур для металлов $A_T = 0,1 \dots 0,4$, а для угля и окислов металлов $A_T = 0,5 \dots 0,9$.

Для реальных нечерных тел можно ввести понятие эффективной радиационной температуры T_p , которая определяется как температура абсолютно черного тела, имеющего такую же энергетическую светимость, что и реальное тело. Радиационная температура тела T_p всегда меньше истинной температуры тела T . Действительно, для реального тела $R = \sigma T_p^4 = A_T \sigma T^4$. Следовательно,

$$T_p = T \cdot \sqrt[4]{A_T}.$$

Поскольку у реальных тел $A_T < 1$, то $T_p < T$.

Радиационную температуру сильно нагретых раскаленных тел можно определить с помощью радиационного пирометра (рис. 2.5), в котором изображение достаточно удаленного нагретого источника I проецируется с помощью объектива L на приемник Π так, чтобы изображение излучателя полностью перекрывало приемник. Для оценки энергии излучения, попавшего на приемник, обычно используются металлические или полупроводниковые болометры или термоэлементы. Действие болометров основано на изменении электрического сопротивления металла или полупроводника при изменении температуры, вызванном поглощением падающего потока излучения. Изменение температуры поглощающей поверхности термоэлементов приводит к появлению в них термоЭДС.

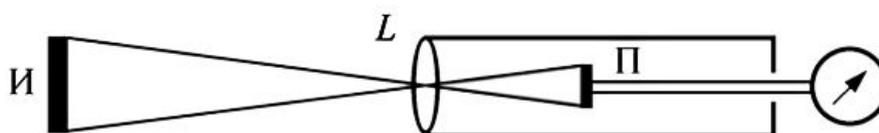


Рис. 2.5. Устройство радиационного пирометра

Показание прибора, подсоединенного к болометру или термоэлементу, оказывается пропорциональным энергии излучения, попавшей на приемник пирометра. Проградуировав предварительно пирометр по излучению эталона абсолютно черного тела при различных температурах, можно по шкале прибора измерять радиационные температуры различных нагретых тел.

Зная интегральную поглощательную способность материала излучателя, можно перевести измеренную радиационную температуру излучателя T_p в его истинную температуру T по формуле

$$T = T_p / \sqrt[4]{A_T}.$$

В частности, если радиационный пирометр покажет температуру $T_p = 933$ К при наблюдении раскаленной поверхности вольфрамового излучателя ($A_T = 0,15$), то ее истинная температура $T = 1500$ К.

Закон смещения Вина. В 1893 г. немецкий физик В. Вин теоретически рассмотрел термодинамический процесс сжатия излучения, заключенного в полости с идеально зеркальными стенками. Учитывая изменения частоты излучения за счет эффекта Доплера при отражении от движущегося зеркала, Вин пришел к выводу, что испускательная способность абсолютно черного тела должна иметь вид

$$r_{\omega, T}^* = \omega^3 f\left(\frac{\omega}{T}\right).$$

Здесь f – некоторая функция, конкретный вид которой термодинамическими методами установить нельзя.

Переходя в этой формуле Вина от частоты к длине волны, в соответствии с правилом $r_{\lambda,T}^* d\lambda = r_{\omega,T}^* d\omega$, получим

$$r_{\lambda,T}^* = \frac{(2\pi c)^4}{\lambda^5} f\left(\frac{2\pi c}{\lambda T}\right).$$

В выражение для спектральной испускательной способности $r_{\lambda,T}^*$ температура входит в виде произведения λT . Это позволяет предсказать некоторые особенности функции $r_{\lambda,T}^*$. Функция достигает максимума на длине волны λ_m , которая при изменении температуры тела изменяется так, чтобы выполнялось условие

$$\lambda_m T = \text{const.}$$

Таким образом, В. Вин сформулировал закон теплового излучения – закон смещения Вина, согласно которому длина волны λ_m , на которую приходится максимум испускательной способности абсолютно черного тела, обратно пропорциональна его абсолютной температуре.

Этот закон можно записать в виде

$$\lambda_m = \frac{b}{T}.$$

Значение постоянной Вина равно: $b = 2,898 \cdot 10^{-3}$ м·К.

Закон смещения Вина показывает, что при повышении температуры абсолютно черного тела положение максимума его испускательной способности смещается в область коротких длин волн. Результаты экспериментов приведены на рис. 2.4.

Для реальных тел закон Вина выполняется лишь качественно. С ростом температуры любого тела длина волны, вблизи которой тело излучает больше всего энергии, также смещается в сторону коротких длин волн. Это смещение, однако, уже не описывается простой формулой $\lambda_m = b/T$, которую для излучения реальных тел можно использовать только в качестве оценочной.

2.4. Классическая теория теплового излучения Ультрафиолетовая катастрофа

Объемная спектральная плотность энергии равновесного излучения. Предположим, что полость с идеально отражающими стенками имеет форму куба с ребром ℓ . Поместим в эту полость малое по размерам абсолютно черное тело, имеющее температуру T . За счет испускания и поглощения электромагнитных волн этим телом полость равномерно заполнится равновесным тепловым излучением с определенной объемной спектральной плотностью энергии $u(\omega, T)$, зависящей от температуры. Функция $u_{\omega, T} \equiv u(\omega, T)$ определяет объемную плотность энергии излучения, приходящуюся на единичный интервал частот вблизи частоты ω .

Интегральную объемную плотность энергии теплового излучения можно представить в виде

$$u(T) = \int_0^{\infty} u_{\omega, T} d\omega.$$

Спектральная плотность энергии теплового излучения связана с испускательной способностью абсолютно черного тела, находящегося в равновесии с этим излучением. Рассмотрим излучение вблизи элементарной площадки ΔS , выделенной на поверхности абсолютно черного тела (рис. 2.6).

Тепловое излучение в любой точке пространства вблизи выделенной площадки равномерно распределено по всевозможным направлениям в пределах телесного угла 4π . Плотность энергии излучения, приходящегося на телесный угол $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, то есть падающего на площадку ΔS под углом θ к ее нормали, можно записать в виде

$$d\tilde{u} = u(T) \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

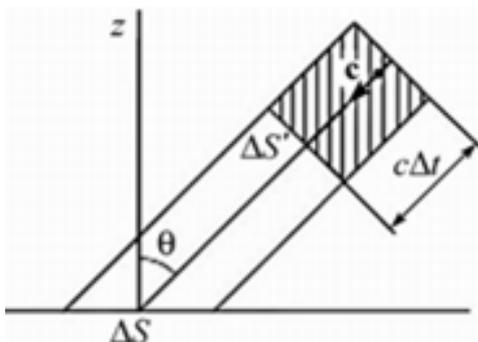


Рис. 2.6. Излучение вблизи элементарной площадки ΔS на поверхности абсолютно чёрного тела

Если излучение с плотностью энергии $d\tilde{u}$, распространяясь со скоростью света в вакууме c , падает на площадку ΔS под углом θ к нормали, то за время Δt на эту площадку попадает вся энергия излучения, заключенная в заштрихованной на рис. 2.6 области и равная

$$dw = d\tilde{u}c\Delta t\Delta S = d\tilde{u}c\Delta t\Delta S \cos\theta = \frac{c}{4\pi}u(T) \cdot \cos\theta \sin\theta d\theta d\varphi \Delta S \Delta t.$$

Суммируя энергии излучения, падающего под всевозможными углами на единицу поверхности в единицу времени, находим полный поток энергии Φ излучения:

$$\Phi = \frac{c}{4\pi}u(T) \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \cos\theta \cdot \sin\theta d\theta = \frac{c}{4}u(T).$$

В состоянии термодинамического равновесия такой же поток должен излучаться с единицы поверхности абсолютно черного тела. Этот поток энергии, по определению, есть энергетическая светимость абсолютно черного тела. Поэтому

$$R^* = \frac{c}{4}u(T) \quad \text{или} \quad u(T) = \frac{4}{c}R^*.$$

Аналогичные рассуждения справедливы для каждой спектральной составляющей излучения на частоте ω . Поэтому тем же соотношением связаны спектральная испускательная способность абсолютно черного тела $r_{\omega,T}^*$ и спектральная объемная плотность энергии равновесного теплового излучения $u_{\omega,T}$:

$$r_{\omega,T}^* = \frac{c}{4}u_{\omega,T} \quad \text{или} \quad u_{\omega,T} = \frac{4}{c}r_{\omega,T}^*.$$

Покажем, что если излучение формируется в объеме достаточно толстого слоя произвольного вещества, имеющего на единицу толщины испускательную способность $E_{\omega,T}$ и поглощательную способность $A_{\omega,T}$, то поверхность этого толстого слоя излучает как абсолютно черное тело. При расчетах ограничимся рассмотрением излучения, распространяющегося в направлении, перпендикулярном поверхности слоя.

Пусть слой вещества, занимающего полупространство $x > 0$, имеет температуру T (рис. 2.7). Выделим тонкий слой этого вещества с координатами от x до $(x + dx)$. На частоте ω этот тонкий слой излучает по направлению к поверхности поток энергии с единицы площади $dr_{\omega,T} = E_{\omega,T} dx$.

До выхода с поверхности слоя это излучение проходит слой поглощающего вещества толщиной x . По закону Бугера поток энергии излучения уменьшается экспоненциально и при выходе на поверхность ($x = 0$) становится равным

$$dr_{\text{пов}} = dr_{\omega,T} \exp(-A_{\omega,T}x) = E_{\omega,T} \exp(-A_{\omega,T}x) dx.$$

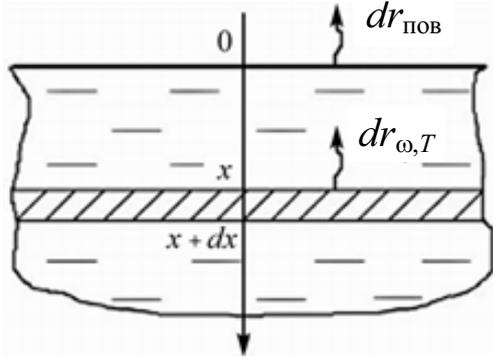


Рис. 2.7. Расчёт излучения из толстого слоя вещества

Суммируя излучение от всех слоев, находим испускательную способность поверхности слоя

$$r_{\text{пов}} = \int_0^{\infty} E_{\omega,T} \exp(-A_{\omega,T}x) dx = \frac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}} \int_0^{\infty} \exp(-\xi) d\xi = \frac{E_{\omega,T}}{A_{\omega,T}}.$$

Но по закону Кирхгофа $E_{\omega,T}/A_{\omega,T} = r_{\omega,T}^*$. Поэтому $r_{\text{пов}} = r_{\omega,T}^*$, т. е. поверхность слоя излучает как абсолютно черное тело. Это поясняет, например, почему излучение с поверхности достаточно большого объема высокотемпературной плазмы и, в частности, с поверхности Солнца, близко по спектральному составу к излучению абсолютно черного тела.

Пример. Исследование спектра излучения Солнца показывает, что длина волны λ_m , на которую приходится максимум испускательной способности Солнца, примерно равна 0,5 мкм. Принимая Солнце за абсолютно черное тело, определим: 1) эффективную температуру поверхности Солнца; 2) энергетическую светимость R Солнца; 3) полную мощность W_c излучения с поверхности Солнца; 4) суммарную площадь S_n панелей солнечной батареи мощностью $W_n = 10$ кВт на орбитальной околоземной станции. КПД солнечной батареи принять равным $\eta = 20\%$.

1) Согласно закону смещения Вина эффективная температура поверхности Солнца равна:

$$T = b/\lambda_m = 2,9 \cdot 10^{-3} / 5 \cdot 10^{-7} \approx 5800 \text{ К.}$$

2) По закону Стефана–Больцмана энергетическая светимость Солнца $R = \sigma T^4$;

$$R = 5,67 \cdot 10^{-8} \cdot 5800^4 \approx 6,4 \cdot 10^7 \text{ Вт/м}^2.$$

3) Полная мощность излучения с поверхности Солнца (его светимость):

$$W = 4\pi R_c^2 \cdot R,$$

где $R_c = 6,96 \cdot 10^8$ м – радиус Солнца.

$$W = 4\pi \cdot (6,96 \cdot 10^8)^2 \cdot 6,4 \cdot 10^7 = 3,89 \cdot 10^{26} \text{ Вт/м}^2.$$

- 4) Считая, что Солнце излучает по всем направлениям изотропно, находим солнечную постоянную C^* :

$$C = \frac{W}{4\pi R_{СЗ}^2} = \frac{3,89 \cdot 10^{26}}{4\pi \cdot (1,496 \cdot 10^{11})^2} = 1383 \text{ Вт/м}^2,$$

где $R_{СЗ} = 1,496 \cdot 10^{11} \text{ м}$ – среднее расстояние от Солнца до Земли.

Вблизи Земли на каждый квадратный метр поверхности, перпендикулярной солнечным лучам, за одну секунду падает 1383 Дж энергии солнечного излучения. Часть этой энергии в солнечной батарее превращается в электрическую энергию. С учетом КПД солнечной батареи находим ее электрическую мощность:

$$W_{п} = \eta C S_{п}.$$

Отсюда площадь панелей солнечной батареи равна

$$S_{п} = W_{п} / (\eta C) = 10^4 / (0,2 \cdot 1383) = 36,2 \text{ м}^2.$$

Формула Рэлея–Джинса. В полости кубической формы с идеально отражающими стенками тепловое излучение как электромагнитное поле может существовать только в виде суперпозиции прямых и отраженных волн, то есть в виде стоячих электромагнитных волн, имеющих узлы на стенках полости.

Направим оси декартовой системы координат вдоль трех взаимно перпендикулярных ребер кубической полости (рис. 2.8) и обозначим через \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y и \mathbf{e}_z единичные орты вдоль соответствующих осей координат.

Для волны, распространяющейся вдоль оси x , условие образования стоячей волны требует, чтобы на длине l между отражающими стенками укладывалось целое число длин полувольт:

$$l = n_1 \frac{\lambda}{2}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots$$

Для такой волны волновой вектор $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x$, где $k_x = 2\pi/\lambda$, и условие образования стоячей волны в направлении оси x можно записать в виде:

$$k_x = n_1 \frac{\pi}{l}, \quad n_1 = 1, 2, 3, \dots$$

^{*} Солнечная постоянная – полное количество лучистой энергии Солнца, падающее вне атмосферы Земли на площадку единичной площади, расположенную перпендикулярно солнечным лучам на среднем расстоянии от Земли до Солнца $1,496 \cdot 10^{11} \text{ м}$ (1 а. е.). В СИ солнечная постоянная $C = (1373 \pm 20) \text{ Вт/м}^2$.

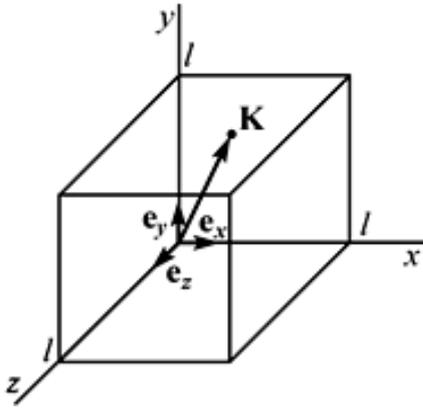


Рис. 2.8. В полости кубической формы с идеально отражающими стенками тепловое излучение представляет суперпозицию стоячих электромагнитных волн, имеющих узлы на стенках полости

Аналогичные рассуждения для волн, распространяющихся вдоль осей y и z , позволяют сформулировать общий вывод о том, что для стоячей волны, являющейся суперпозицией прямых и отраженных волн, распространяющихся в кубической полости в произвольном направлении, задаваемом волновым вектором

$$\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y + k_z \mathbf{e}_z,$$

должны выполняться условия:

$$k_x = n_1 \frac{\pi}{l}, \quad k_y = n_2 \frac{\pi}{l}, \quad k_z = n_3 \frac{\pi}{l}.$$

Здесь n_1 , n_2 и n_3 — целочисленные параметры, принимающие независимо друг от друга значения 1, 2, 3 и т. д.

Модуль волнового вектора равен:

$$k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} = \frac{\pi}{l} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}; \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3 \dots$$

Поскольку $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$, то равновесное тепловое излучение в кубической полости можно рассматривать как совокупность стоячих электромагнитных волн различных частот, значения которых определяются соотношением

$$\omega = \frac{\pi c}{l} \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}; \quad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3 \dots$$

Каждой тройке целых неотрицательных чисел n_1 , n_2 , n_3 соответствует одна стоячая волна. Общее число таких стоячих волн бесконечно велико.

Определим число стоячих электромагнитных волн в полости с частотами, которые не превышают заданного значения ω . Для этого рассмотрим дискретное трехмерное пространство Z^3 (рис. 2.9), в котором каждая точка с целочисленными неотрицательными координатами n_1 , n_2 и n_3 соответствует отдельной стоячей электромагнитной волне в по-

лости с равновесным тепловым излучением. Эти точки разбивают пространство Z^3 на ячейки единичного объема. Целочисленные неотрицательные координаты n_1 , n_2 и n_3 удовлетворяют уравнению сферической поверхности в пространстве Z^3 :

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = R^2.$$

Здесь $R = l\omega/(\pi c)$ – радиус сферы.

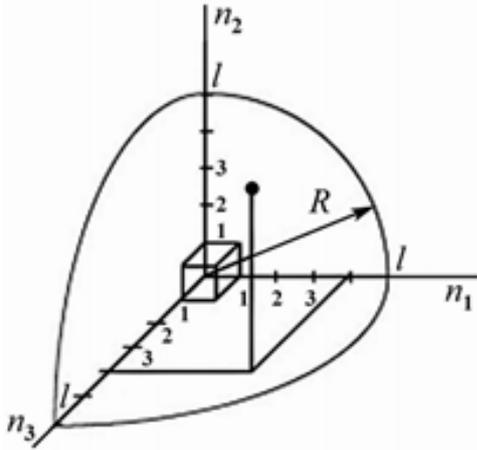


Рис. 2.9. Дискретное трёхмерное пространство Z^3 , в котором каждая точка с целочисленными неотрицательными координатами n_1 , n_2 и n_3 соответствует отдельной стоячей электромагнитной волне в полости

Число \tilde{N} стоячих волн в полости, частоты которых не превосходят значения ω , равно числу изображающих точек из положительного октанта пространства Z^3 , попавших в шар радиуса R .

Так как с каждой точкой в пространстве Z^3 связана ячейка единичного объема, то объем $1/8$ части шара радиуса R и определяет искомое число точек (стоячих волн). Поэтому

$$\tilde{N} = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{1}{6} \frac{\omega^3 l^3}{\pi^2 c^3} = \frac{1}{6} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot V.$$

Здесь $V = l^3$ – объем полости, в которой заключено рассматриваемое равновесное тепловое излучение.

Электромагнитные волны – поперечные волны, и в каждом направлении \mathbf{k} в полости в общем случае могут распространяться две волны, поляризованные во взаимно перпендикулярных плоскостях. Поэтому число стоячих волн с частотой, не превышающей заданного значения ω , следует удвоить:

$$N = 2\tilde{N} = \frac{1}{3} \frac{\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot V.$$

Число стоячих волн в полости в интервале частот от ω до $(\omega + d\omega)$:

$$dN = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} \cdot V.$$

Обозначим через $\langle \varepsilon \rangle$ среднюю энергию стоячей электромагнитной волны частоты ω . Согласно определению спектральной плотности энергии равновесного теплового излучения имеем

$$u_{\omega,T} \cdot d\omega = \frac{\langle \varepsilon \rangle}{V} dN.$$

Отсюда находим

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} \langle \varepsilon \rangle.$$

Развивая теорию теплового излучения, Д. Рэлей (1900 г.) и Д. Джинс (1905 г.) предложили рассмотреть каждую стоячую электромагнитную волну как объект с двумя степенями свободы, одна из которых электрическая, а другая – магнитная. Согласно классической теореме о равномерном распределении энергии по степеням свободы, в состоянии термодинамического равновесия на каждую степень свободы системы приходится в среднем энергия, равная $\frac{1}{2}kT$, где $k = 1,3806504(24) \cdot 10^{-23}$ Дж/К (на 2002 г.) – постоянная Больцмана. Поэтому для равновесного теплового излучения при температуре T на каждую стоячую электромагнитную волну частоты ω приходится в среднем энергия

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{2}kT + \frac{1}{2}kT = kT.$$

В таком случае получаем

$$u_{\omega,T} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3} kT.$$

Поскольку $r_{\omega,T}^* = cu_{\omega,T}/4$, то полученную формулу для спектральной плотности энергии равновесного теплового излучения можно преобразовать в формулу Рэля–Джинса для испускательной способности абсолютно черного тела:

$$r_{\omega,T}^* = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT.$$

Формула Рэля–Джинса хорошо описывает излучение абсолютно черного тела в области малых частот или больших длин волн и резко расходится с опытом при больших частотах или малых длинах волн излучения. Кроме того, интегрируя $u_{\omega,T}$ по всем частотам, мы получаем бесконечные значения интегральной плотности энергии равновесного теплового излучения $u(T)$ и энергетической светимости абсолютно черного тела R^* :

$$u(T) = \frac{4}{c} R^* = \int_0^{\infty} u_{\omega, T} d\omega = \frac{kT}{\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} \omega^2 d\omega \rightarrow \infty.$$

Следовательно, классическая теория теплового излучения приводит к выводу о том, что при конечных значениях энергии излучения равновесие между веществом и излучением невозможно. И при сколь угодно низких температурах тела в области высоких частот плотность энергии теплового излучения неограниченно возрастает.

Такой противоречивый результат, содержащийся в формуле Рэля—Джинса, вывод которой с точки зрения классической теории не вызывал сомнений, Пауль Эренфест назвал «ультрафиолетовой катастрофой».

2.5. Гипотеза о квантах. Формула Планка

«Ультрафиолетовая катастрофа» показала, что классическая физика содержит ряд принципиальных внутренних противоречий, которые проявились в теории теплового излучения, и разрешить их можно только с помощью принципиально новых физических идей.

Такая физическая идея была сформулирована в 1900 г. М. Планком в виде гипотезы о квантах. Согласно этой гипотезе, излучение испускается и поглощается веществом не непрерывно, а конечными порциями энергии, которые Планк назвал квантами энергии. Величина кванта энергии зависит от частоты излучения и определяется формулой

$$E = h\nu = \hbar\omega.$$

Здесь $h = 2\pi\hbar$ — новая фундаментальная физическая константа, которую называют постоянной Планка. Наиболее точное значение постоянной Планка получено на основе эффекта Б. Джозефсона $h = 6,62606896(33) \cdot 10^{-34}$ Дж·с (на 2002 г).

Так как размерность этой постоянной «энергия × время» совпадает с размерностью величины, которую в механике называют действием, то постоянную Планка называют также квантом действия.

Гипотеза Планка о квантах нарушила «очевидное» правило классической физики о том, что любая физическая величина, в том числе и энергия, изменяется непрерывным образом, и за бесконечно малый промежуток времени ее изменение всегда бесконечно мало. Гипотеза Планка оказала огромное влияние на последующее развитие физики.

Развитие гипотезы Планка о квантах, высказанной в начале XX столетия, привело к появлению квантовой механики – современной физической теории, которая за последующие сто лет бурно развивалась и позволила физикам создать законченную и непротиворечивую картину микромира на уровне атомных явлений. С помощью идеи о квантовании энергии излучения Планку удалось дать теоретическое описание равновесного теплового излучения, сняв все противоречия классической теории.

Основное отличие квантовой теории излучения от классической проявляется при расчете средней энергии излучения частоты ω . С учетом условия квантования средняя энергия излучения определяется по формуле:

$$\langle \varepsilon \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P_n \varepsilon_n.$$

Здесь $\varepsilon_n = n\hbar\omega$ – возможные значения энергии излучения, а P_n – вероятность того, что в состоянии термодинамического равновесия при температуре T излучение будет иметь энергию ε_n . Вероятность P_n задается распределением Больцмана:

$$P_n = A \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right).$$

Поскольку

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1,$$

то для константы A получаем значение

$$A = \left[\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{\varepsilon_n}{kT}\right) \right]^{-1}.$$

Среднее значение энергии излучения частоты ω в квантовой системе:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega \cdot \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{kT}\right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{n\hbar\omega}{kT}\right)} = \hbar\omega \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \cdot \exp(-n\xi)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp(-n\xi)}, \text{ где } \xi = \frac{\hbar\omega}{kT}.$$

Согласно формуле геометрической прогрессии

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-n\xi) = \frac{1}{1 - \exp(-\xi)}.$$

Дифференцируя это соотношение по ξ , находим сумму ряда

$$\sum_{n=0}^{\infty} n \exp(-n\xi) = -\frac{dS}{d\xi} = \frac{\exp(-\xi)}{[1 - \exp(-\xi)]^2}.$$

Подставляя значения сумм в выражение для $\langle \varepsilon \rangle$, определим среднюю энергию излучения частоты ω в квантовой теории:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

Для малых частот, когда

$$\frac{\hbar\omega}{kT} \ll 1, \quad \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT},$$

приходим к формуле классической теории:

$$\langle \varepsilon \rangle = kT.$$

В области больших частот отличие средней энергии излучения, рассчитанной по формулам классической и квантовой физики, становится существенным. Именно в этой области частот классическая теория излучения приводит к «ультрафиолетовой катастрофе». Квантовая теория излучения устраняет это противоречие теории и эксперимента. Подставляя формулу для $\langle \varepsilon \rangle$ в выражение для спектральной плотности равновесного теплового излучения, получаем известную формулу Планка для спектральной плотности энергии равновесного теплового излучения $u_{\omega,T}$:

$$u_{\omega,T} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

Спектральная испускательная способность абсолютно черного тела, или функция Планка, с учетом условия квантования, имеет вид ($r_{\omega,T}^* = cu_{\omega,T}/4$):

$$r_{\omega,T}^* \equiv f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{1}{e^{\hbar\omega/(kT)} - 1}.$$

Функция Планка полностью соответствует результатам экспериментальных исследований излучения абсолютно черного тела на всех частотах и при всех температурах^{*)}. При низких частотах формула квантовой теории излучения переходит в формулу Рэлея–Джинса классической теории. При высоких частотах ($\hbar\omega \gg kT$)

^{*)} В 1916 году А. Эйнштейн вывел закон Планка путём рассмотрения квантовых переходов для атомов, находящихся в равновесии с излучением (см. гл. 4, п. 4.6). Закон Планка является частным случаем распределения Бозе–Эйнштейна.

$$\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \gg 1,$$

формула Планка переходит в соотношение:

$$f(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2c^2} \cdot \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right),$$

структуру которого предсказал в 1893 г. В. Вин.

Покажем, что гипотеза Планка приводит к закону Стефана–Больцмана и позволяет определить значение постоянной Стефана–Больцмана через фундаментальные постоянные. Интегрируя функцию Планка для $r_{\omega, T}^*$ по всем частотам, находим энергетическую светимость абсолютно черного тела. Перейдя в интеграле к переменной $x = \hbar\omega/kT$, имеем

$$R^* = \int_0^{\infty} r_{\omega, T}^* d\omega = \frac{\hbar}{4\pi^2c^2} \int_0^{\infty} \frac{\omega^3 d\omega}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} = \frac{k^4 T^4}{4\pi^2c^2\hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Это соотношение соответствует закону Стефана–Больцмана, так как оно может быть записано в виде $R = \sigma T^4$, где постоянная

$$\sigma = \frac{k^4}{4\pi^2c^2\hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1}.$$

Используя табличное значение определенного интеграла

$$I = \int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{e^x - 1} = \int_0^{\infty} \frac{x^3 e^{-x} dx}{1 - e^{-x}} = \frac{\pi^4}{15},$$

выразим постоянную Стефана–Больцмана через универсальные константы k , c и \hbar :

$$\sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60c^2\hbar^3} = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{К}^{-4}.$$

Планк, пользуясь экспериментальным значением σ , по этой формуле впервые определил величину постоянной \hbar .

Воспользуемся функцией Планка для испускательной способности абсолютно черного тела и найдем постоянную b в законе смещения Вина.

С помощью замены переменной $\omega = 2\pi c/\lambda$ и с учетом условия $r_{\omega, T}^* d\omega = r_{\lambda, T}^* d\lambda$, преобразуем функцию Планка для испускательной способности абсолютно черного тела к переменным λ и T :

$$r_{\lambda, T}^* \equiv \varphi(\lambda, T) = \frac{2\pi\hbar c^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\hbar c/(\lambda kT)} - 1}.$$

Вводя обозначение $z = hc/(\lambda kT)$, представим функцию φ в виде

$$\varphi = A \cdot \frac{z^5}{e^z - 1}, \quad A = \text{const.}$$

Найдем значение z_m , соответствующее максимуму функции φ . Для этого приравняем к нулю производную:

$$\frac{d\varphi}{dz} = A \frac{5z^4(e^z - 1) - z^5 e^z}{(e^z - 1)^2}.$$

Из трансцендентного уравнения

$$5(e^{z_m} - 1) - z_m e^{z_m} = 0.$$

или

$$z_m = 5(1 - e^{-z_m}).$$

Также решение этого уравнения можно найти методом последовательных приближений, считая, что $e^{-z_m} \ll 1$. В первом приближении получаем $z_m = 5$. Во втором приближении

$$z_m^{(2)} = 5 \cdot (1 - e^{-5}) = 4,966.$$

Величину $z_m^{(2)}$ можно взять в качестве приближенного решения трансцендентного уравнения.

Испускательная способность абсолютно черного тела достигает максимума при длине волны λ_m , для которой

$$\frac{hc}{\lambda_m kT} = 4,966.$$

Отсюда находим постоянную Вина $b = \lambda_m T$:

$$b = \lambda_m T = \frac{hc}{4,966k} = 2,9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К},$$

выраженную через универсальные константы k , c и h .

2.6. Тепловое излучение Вселенной

Энергия излучения дает существенный вклад во внутреннюю энергию системы при больших температурах. Одной из таких систем является высокотемпературная плазма. В таком состоянии вещества фотонный газ наряду с газом частиц должен быть включен в рассмотрение равноправным элементом системы. Многие свойства высокотемпературной плазмы можно объяснить, изучая взаимодействие фотонного газа с газом частиц.

Интересный пример такого взаимодействия представляет современная космологическая теория, описывающая ранние стадии эволюции Вселенной. Эта теория утверждает, что вся наша Вселенная возникла приблизительно 10–20 миллиардов лет назад в результате большого взрыва. Взрыв образовал в очень малом объеме пространства горячий «котел», в котором при фантастически больших плотностях и температурах находилось все вещество нашей Вселенной. По оценкам Г. Гамова, через 100 с после взрыва плотность вещества была в тысячи раз больше плотности воды, а температура ($T \sim 10^9$ К) значительно превышала температуру в центре термоядерного взрыва. В этот момент материя существовала в виде высокотемпературной плазмы, состоящей из протонов, нейтронов, электронов, фотонов, нейтрино и их античастиц. Вещество в таком состоянии было ионизовано и непрозрачно для излучения, и излучение находилось «в плену» вещества.

Согласно теории А.А. Фридмана, высказанной еще в 1922 г., после взрыва Вселенная начала расширяться. В результате расширения Вселенной температура вещества и излучения уменьшалась, достигнув через тысячу лет после взрыва значения $T_* = 3000$ К. Плотность вещества во Вселенной к этому времени приняла значение порядка $\rho_* \sim 10^{-17}$ кг/м³. В этих условиях электроны, протоны и нейтроны объединялись, образуя атомы водорода, гелия и других легких элементов. Среда, состоящая из таких нейтральных атомов, становится прозрачной для излучения, и оно «отрывается» от вещества. Начиная с этого момента времени фотонный газ занимает весь объем Вселенной и расширяется вместе с ней. Это расширение фотонного газа можно считать адиабатическим.

По мере роста объема расширяющейся Вселенной температура фотонного газа, заполняющего ее, будет уменьшаться. Расчет (см. ниже) показывает, что в результате такого процесса вся Вселенная к настоящему времени должна быть заполнена равновесным излучением с температурой 2,7 К. Так как это тепловое космическое излучение представляет собой первичное излучение, зародившееся на ранней стадии эволюции Вселенной, то известный астрофизик И.С. Шкловский назвал его реликтовым (от лат. *relictus* – *оставленный*). Оценки показывают, что сейчас в каждом кубическом сантиметре Вселенной находится порядка 400...500 фотонов реликтового излучения (плотности энергии излучения 0,25 эВ/см³). При этом на каждый атом во Вселенной приходится $\sim 10^9$ фотонов реликтового (фонового) излучения.

В 1965 г. американские инженеры А. Пензиас и Р. Уилсон при отладке приемника радиотелескопа обнаружили слабый фоновый радио-

шум на длине волны 7,3 см, приходящий из космоса в виде равномерно распределенного по небесной сфере излучения с максимумом энергии на длине волны $\lambda_m \approx 1,1$ мм (рис. 2.10). Закон Вина $\lambda_m = b/T_m$ позволяет оценить, что на такой длине волны находится максимум энергии равновесного теплового излучения при температуре $T = 2,7$ К. Так, в какой-то мере случайно было обнаружено реликтовое тепловое излучение как след процессов, происходивших во Вселенной в далеком прошлом.

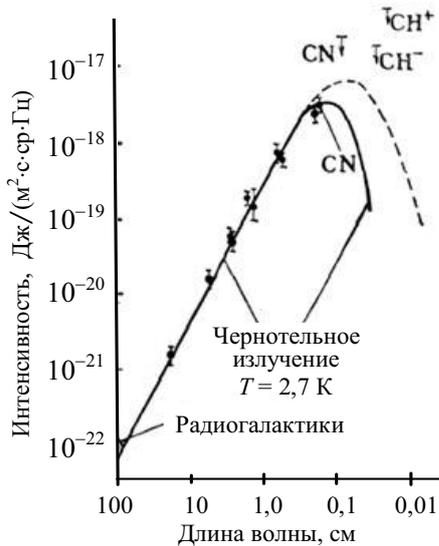


Рис. 2.10. Спектр электромагнитного фонового излучения Вселенной. Экспериментальные точки нанесены с указанием погрешностей измерений. Точки CN, CH соответствуют результатам определения верхней границы (показана стрелкой) температуры излучения по населённости уровней соответствующих межзвёздных молекул

Открытие реликтового излучения, удостоенное в 1978 г. Нобелевской премии по физике, является важным достижением современной науки. Оно подтверждает правильность теории «горячей» расширяющейся Вселенной, описывающей эволюцию Вселенной в течение десятков миллиардов лет. Из этой теории следует, что на ранней стадии эволюции Вселенная существенно отличалась от современной и представляла собой сгусток сверхплотной плазмы и излучения с очень высокой температурой, рожденных в момент большого взрыва.

Пример. Определим число фотонов в единице объема пространства, заполненного равновесным тепловым излучением при температуре T .

Обозначим через n_ω объемную концентрацию фотонов теплового излучения в интервале частот от ω до $(\omega + d\omega)$. Концентрация фотонов излучения всевозможных частот определится как

$$n_\phi = \int_0^\infty n_\omega d\omega.$$

По определению спектральная объемная плотность энергии излучения $u_{\omega,T} = \hbar\omega n_\omega$. С учетом формулы Планка

$$u_{\omega,T} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{\hbar\omega/(kT)} - 1},$$

имеем

$$n_{\phi} = \int_0^{\infty} \frac{u_{\omega,T}}{\hbar\omega} d\omega = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar c} \right)^3 \int_0^{\infty} \frac{\xi^2 d\xi}{\exp \xi - 1} = \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar c} \right)^3 \cdot I.$$

Интеграл I приближенно равен 2,4. Для расчета концентрации фотонов получаем

$$n_{\phi} = \frac{2,4}{\pi^2} \left(\frac{kT}{\hbar c} \right)^3,$$

или $n_{\phi} = 2 \cdot 10^7 \cdot T^3 \text{ м}^{-3} = 20 \cdot T^3 \text{ см}^{-3}$.

По этой формуле находим, что $n_{\phi} = 2 \cdot 10^{10} \text{ м}^{-3}$ при $T = 10 \text{ К}$ и $n_{\phi} = 2 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ при $T = 1000 \text{ К}$. Такая зависимость концентрации частиц от температуры является характерной особенностью фотонного газа.

В теории «горячей» Вселенной считается, что «отрыв» излучения от вещества на ранней стадии эволюции Вселенной произошел при температуре $T_* = 3000 \text{ К}$ и плотности вещества $\rho_* \sim 10^{-17} \text{ кг/м}^3$ в процессе образования атомов и нейтрализации вещества. В настоящее время плотность вещества во Вселенной $\rho_0 \sim 10^{-26} \text{ кг}$. Оценим температуру реликтового излучения на современном этапе эволюции Вселенной.

Предположим, что излучение, заполняющее Вселенную, расширяется вместе с ней адиабатно. С учетом уравнения адиабаты для фотонного газа находим

$$T_*^3 V_* = T_0^3 V_0,$$

где T_0 — искомая температура реликтового излучения в настоящее время, а V_* и V_0 — объемы расширяющейся Вселенной на ранней и современной стадиях ее эволюции.

Считая массу вещества во Вселенной неизменной и равной M , определим плотности вещества $\rho_* = M/V_*$, $\rho_0 = M/V_0$:

$$T_0^3 = \frac{V_*}{V_0} T_*^3 = \frac{\rho_0}{\rho_*} T_*^3.$$

Отсюда получаем

$$T_0 = T_* \sqrt[3]{\rho_0 / \rho_*}.$$

Подставляя значения плотностей ρ_* и ρ_0 , находим $T_0 = 10^{-3} T_* = 3 \text{ К}$.

До такой температуры «остыло» излучение в расширяющейся Вселенной к настоящему времени. Экспериментально определенная температура реликтового излучения $T = (2,7 \pm 0,3) \text{ К}$ (рис. 2.10) оказалась очень близка к расчетной. Температуре равновесного реликтового излучения соответствует концентрация фотонов $n_{\phi} \approx 400 \text{ см}^{-3}$.

2.7. Фотоэффект

В конце XIX в. был открыт электрон. Генрих Герц обнаружил, что электроны вылетают с некоторых металлических поверхностей, когда на эти поверхности падает свет (рис. 2.11)*. Из дифракционных экспериментов Юнга на двух щелях следовало, что свет — это электромагнитные волны. Волновые свойства позволяли объяснить фотоэффект. Колебания свободного электрона в переменном электрическом поле $E = E_0 \cos \omega t$ происходят с амплитудой

$$A = \frac{eE_0}{m\omega^2}.$$

Соответственно, можно ожидать, что электрон, расположенный вблизи поверхности, покинет металл, когда амплитуда его колебаний A превысит некоторое критическое значение. Из волновой теории света следует: 1) электроны не будут вылетать из металла до тех пор, пока E_0 не превысит определенного критического значения; 2) энергия испущенных электронов возрастает пропорционально E_0^2 ; 3) если величину E_0 (а значит, и интенсивность) поддерживать постоянной, а частоту света ω увеличивать, то число испускаемых электронов должно уменьшаться.

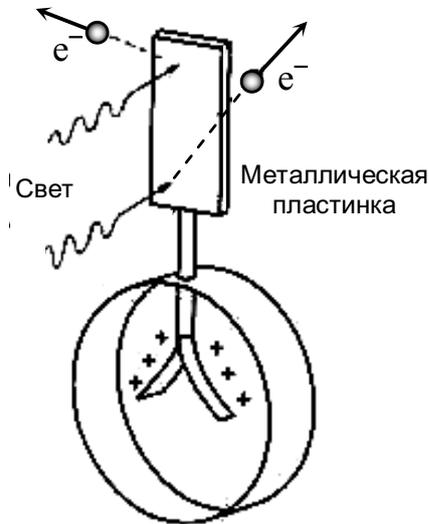


Рис. 2.11. Нейтральный электроскоп, соединённый с металлической пластинкой. При освещении пластинки светом из неё выбиваются фотоэлектроны, и листочки заряжаются положительно

* Фотоэффект — явление, связанное с освобождением электронов твердого тела (или жидкости) под действием электромагнитного излучения. Различают: 1) внешний фотоэффект — испускание электронов под действием света (фотоэлектронная эмиссия), γ -излучения и др.; 2) внутренний фотоэффект — увеличение электропроводности полупроводников или диэлектриков под действием света (фотопроводимость). В данном разделе рассматривается только внешний фотоэффект.

Детальное экспериментальное исследование закономерностей внешнего фотоэффекта для металлов было выполнено в 1888 г. А.Г. Столетовым, и эти экспериментальные наблюдения опровергли предсказания классической электродинамики.

1. Пороговой интенсивности обнаружено не было. Число вылетающих электронов оказалось строго пропорциональным E_0^2 при любой сколь угодно малой интенсивности.
2. Энергия электронов оказалась не зависящей от величины E_0 .
3. Обнаружена зависимость энергии электронов от частоты.

Оказалось, что существует пороговая частота ν_0 — красная граница фотоэффекта. При частотах, превышающих пороговую ν_0 , энергия выбитых электронов линейно увеличивается с ростом частоты. Кинетическая энергия электронов менялась в интервале от нуля до некоторого значения $K_{\text{макс}}$, и не было электронов с энергией больше $K_{\text{макс}}$. На рис. 2.12 приведена найденная из опыта зависимость $K_{\text{макс}}$ от частоты ν .

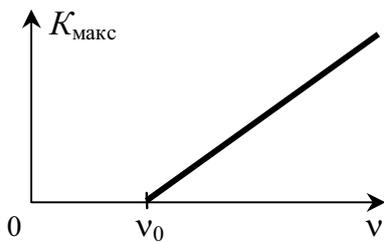


Рис. 2.12. Зависимость максимальной кинетической энергии испущенных металлом электронов от частоты света; ν_0 — красная граница фотоэффекта

Опыты показывают, что кинетическая энергия фотоэлектронов зависит не от интенсивности, а от частоты света и от вещества, из которого сделана облучаемая пластина.

Зависимость, изображенная на рис. 2.12, противоречит обычным классическим представлениям не менее резко, чем обсуждавшееся выше отсутствие связи между кинетической энергией фотоэлектронов и интенсивностью света.

Если считать электроны в металле свободными, то их кинетическая энергия (при данной интенсивности света) с увеличением частоты должна не расти, а падать. В самом деле, уравнение движения свободного электрона под действием электрического вектора световой волны $E_0 \cos \omega t$ записывается в виде

$$m\ddot{x} = eE_0 \cos \omega t.$$

Интегрируя это уравнение, найдем

$$m\nu = \frac{eE_0}{\omega} \cdot \sin \omega t.$$

$$K = \frac{mv^2}{2} = \frac{1}{2m} (mv)^2 = \frac{1}{2m} \left(\frac{eE_0}{\omega} \right)^2 \cdot \sin^2 \omega t.$$

$$K_{\text{макс}} = \frac{1}{2m} \left(\frac{eE_0}{\omega} \right)^2 \quad \text{или} \quad K_{\text{макс}} = \frac{(eE_0)^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{1}{\nu^2}.$$

Таким образом, наблюдающаяся на опыте зависимость $K_{\text{макс}}$ от ν (рис. 2.12) не имеет ничего общего с предсказаниями классической физики для свободных электронов. Аналогично это можно показать и для связанных электронов, для которых из классической физики вытекает резонансная зависимость $K_{\text{макс}}(\nu)$.

В 1905 г. Эйнштейн предположил, что свет представляет собой совокупность квантов, каждый из которых обладает энергией $E = h\nu$. Эйнштейн предположил, что кванты света — фотоны — ведут себя подобно материальным частицам, и при столкновении с электроном в металле фотон может поглотиться, а вся его энергия перейдет к электрону.

Теория Эйнштейна сумела объяснить экспериментальные факты. Для удаления поверхностного электрона из металла необходимо затратить энергию A_0 , равную работе выхода^{*)}. Тогда, поглотив фотон с энергией $h\nu$ и вылетев с поверхности, электрон будет иметь энергию $(h\nu - A_0)$. Это и есть максимально возможная кинетическая энергия:

$$K_{\text{макс}} = h\nu - A_0 \quad (\text{фотоэффект}).$$

Данное соотношение согласуется с экспериментальной прямой, изображенной на рис. 2.12. Эйнштейн предсказал, что наклон прямой должен быть равен постоянной Планка h . Его теория фотоэффекта выдержала это трудное испытание. Наклон действительно оказался равен $h = 6,63 \cdot 10^{-34}$ Дж·с (постоянная Планка) (единицей измерения постоянной Планка в СИ является Дж·с или кг·м²·с⁻¹).

Величина A_0 зависит от свойств материала и состояния поверхности. Свободный электрон вне вещества испытывает вблизи его поверхности притяжение. Если электрон покоился, то в металле он приобретет кинетическую энергию U_0 . Систему электрон—металл можно представить в виде потенциальной ямы глубиной U_0 , как показано на рис. 2.13. Внутри металла внешние атомные электроны оказываются свободными (т. е. они не связаны с определенными атомами), и их кинетическая энергия может меняться от нуля до K_F . Величина K_F называется энергией Ферми.

^{*)} Работа выхода — минимальная энергия, которую необходимо затратить для удаления электрона из конденсированного вещества в вакуум.

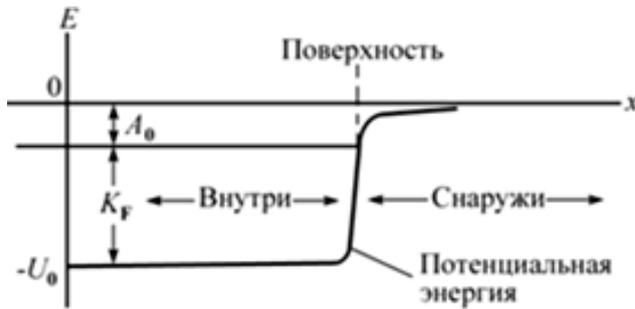


Рис. 2.13. Потенциальная яма, в которой электроны находятся внутри металла. K_F – граничная кинетическая энергия «свободного» электрона в металле

Если электрону с энергией Ферми сообщить дополнительно энергию A_0 , то его энергии $K = K_F + A_0$ хватит на то, чтобы покинуть металл. Иными словами, когда он вылетит из металла, энергия электрона станет равной $K = 0$. Из рис. 2.13 видно, что $A_0 + K_F = U_0$, или

$$A_0 = U_0 - K_F.$$

Схематическая иллюстрация фотоэффекта представлена на рис. 2.14. Первоначально электрон находится на уровне с энергией K_F (этот уровень показан на рисунке штриховой линией). После поглощения фотона с энергией $h\nu$ электрон переходит на более высокий энергетический уровень, обозначенный на рисунке сплошной линией.

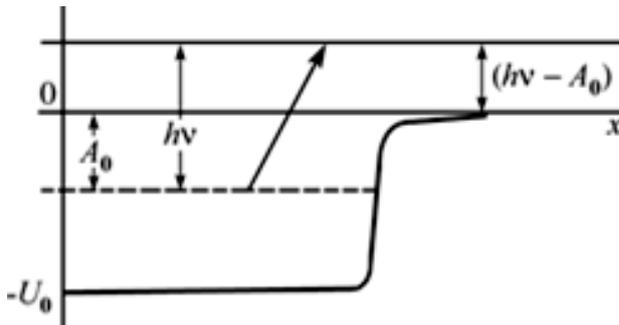


Рис. 2.14. Электрон с энергией $-A_0$ поглощает фотон $h\nu$ и переходит на более высокий уровень

При этом энергия электрона вне металла оказывается равной $(h\nu - A_0)$. Это и есть максимально возможная энергия, которую может иметь испущенный электрон: $K_{\text{макс}} = h\nu - A_0$. Если же электрон находится на более низком уровне (ниже штриховой линии) и поглощает фотон той же энергии, то энергия электрона вне металла будет меньше $K_{\text{макс}}$.

Для цезия работа выхода равна $A_0 = 1,8$ эВ. Найдем максимальную длину волны света, способную выбить из металла электрон с кинетической энергией $K_{\text{макс}} = 2$ эВ.

Из выражения $K_{\text{макс}} = (h\nu - A_0)$ находим частоту:

$$\nu = \frac{K_{\text{макс}} + A_0}{h}.$$

При $A_0 = 2,88 \cdot 10^{-19}$ Дж и $K_{\text{макс}} = 3,2 \cdot 10^{-19}$ Дж этой частоте соответствует длина волны

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{K_{\text{макс}} + A_0} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{3,2 \cdot 10^{-19} + 2,88 \cdot 10^{-19}} = 3,27 \cdot 10^{-7} \text{ м} = 327 \text{ нм}.$$

Единственным возражением к квантовому объяснению фотоэффекта может послужить известный вывод теории о том, что свободный электрон не может поглотить фотон, так как такой процесс запрещен законами сохранения энергии и импульса. Это возражение, однако, снимается, если учесть, что в твердом теле электрон взаимодействует с атомами кристаллической решетки. Поэтому при поглощении электроном фотона часть импульса фотона может быть передана кристаллической решетке вещества.

Покажем, что поглощение фотона при его неупругом соударении со свободным электроном – процесс, запрещенный законами сохранения.

В системе отсчета, в которой до столкновения с фотоном электрон покоился, закон сохранения энергии при неупругом столкновении запишется в виде

$$E_0 + h\nu = E.$$

Здесь $E_0 = m_0c^2$ – энергия покоящегося электрона, а

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2}$$

– энергия движущегося электрона, который после поглощения фотона приобрел импульс p .

Из закона сохранения импульса для рассматриваемого процесса следует

$$p = h\nu/c.$$

Возведем соотношения для E и p в квадрат:

$$c^2p^2 = (h\nu)^2 + 2m_0c^2h\nu \text{ и } c^2p^2 = (h\nu)^2.$$

Для $m_0 \neq 0$ эти уравнения несовместны, что соответствует выводу о том, что свободный электрон не может поглотить фотон. Такой процесс может произойти лишь при наличии третьей частицы, которая способна взять на себя часть энергии и импульса фотона.

2.8. Эффект Комптона

Из классической электродинамики следует, что свет, переносящий энергию E , обладает импульсом $p = E/c = h\nu/c$. Если заменить ν/c на $1/\lambda$, то получим соотношение де Бройля:

$$p = h/\lambda.$$

Световые кванты или фотоны будут вести себя подобно частицам с импульсом $p = h/\lambda$. При фотоэффекте этот импульс передается всему образцу металла и испущенному из него электрону. Импульс, приобретенный металлом в таких условиях, слишком мал и не поддается измерению. Однако при столкновении фотона со свободным электроном величину передаваемого импульса уже можно измерить. Этот процесс — рассеяние фотона на свободном электроне — впервые экспериментально наблюдал Артур Комптон в 1923 г.

При изучении рассеяния монохроматического рентгеновского излучения на парафине ($\lambda \cong 1 \text{ \AA}$). Комптон обнаружил, что длина волны рассеянного излучения λ' больше, чем длина волны падающего излучения λ . Эффект увеличения длины волны излучения, вследствие рассеяния его веществом, получил название эффекта Комптона.

В объяснении эффекта Комптона классическая волновая теория оказалась бессильной, так как согласно этой теории рассеяние света связано с возникновением в веществе под действием падающего света вторичных электромагнитных волн той же длины волны. Открытие и объяснение этого эффекта квантовой оптики в 1927 г. было удостоено Нобелевской премии по физике.

Экспериментальная установка Комптона изображена на рис. 2.15. Рентгеновская трубка (РТ) была смонтирована на вращающейся платформе, что позволяло при ее повороте изменять угол рассеяния θ рентгеновского излучения, попадающего после мишени — рассеивателя М в измерительный блок установки. Для выделения рентгеновского излучения с некоторой длиной λ служит фильтр К.

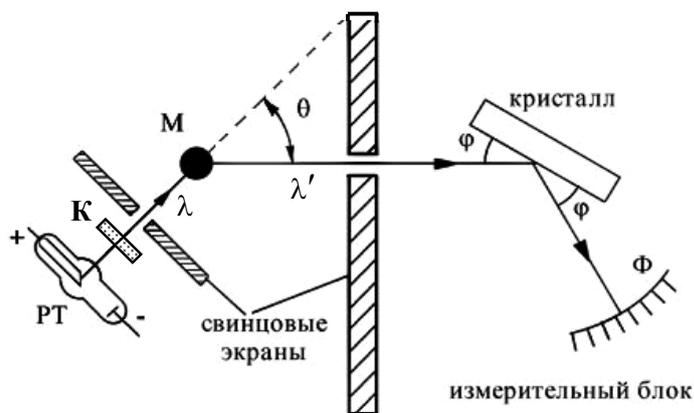


Рис. 2.15. Схема экспериментальной установки Комптона

Детектор в измерительном блоке служит для измерения длины волны рассеянного излучения. В качестве такого детектора использует-

ся дифракционный спектрометр рентгеновских лучей, основной частью которого является кристалл и подвижная ионизационная камера, позволяющая по току в приборе фиксировать отраженное от кристалла рентгеновское излучение.

При отражении от кристалла рентгеновские лучи интерферируют, образуя дифракционные максимумы в направлениях, определяемых формулой Вульфа–Брэгга:

$$2d\sin\varphi = n\lambda,$$

где d – расстояние между атомными плоскостями в кристалле; λ – длина волны рентгеновских лучей; φ – угол между падающим лучом и кристаллической плоскостью (угол скольжения); n – порядок максимума отраженных лучей ($n = 1, 2, 3\dots$).

Было установлено, что длина волны рассеянного излучения превышает длину волны падающего излучения, причем изменение длины волны не зависит от материала рассеивателя, а определяется только величиной угла рассеяния θ . Это говорит о том, что рассеяние определяется взаимодействием фотонов со свободными (или почти свободными) электронами вещества.

Опытным путем Комптон показал, что

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta)$$

– формула Комптона. Из формулы следует, что максимальное изменение $\Delta\lambda$ наблюдается при $\theta = 180^\circ$ (при рассеянии назад), т. е. $\Delta\lambda_{\text{макс}} = 2\lambda_c$. Значение постоянной $\lambda_c = 2,426 \cdot 10^{-12}$ м (комптовская длина волны для электрона) Комптон определил экспериментально.

Выведем соотношение, связывающее длину волны рассеянного фотона с углом рассеяния и длиной волны фотона до соударения. Пусть фотон с импульсом \mathbf{p} и энергией pc сталкивается с неподвижным электроном. Энергия покоя электрона равна m_0c^2 . После соударения фотон отклоняется на угол θ , а импульс фотона становится равным \mathbf{p}' (рис. 2.16).

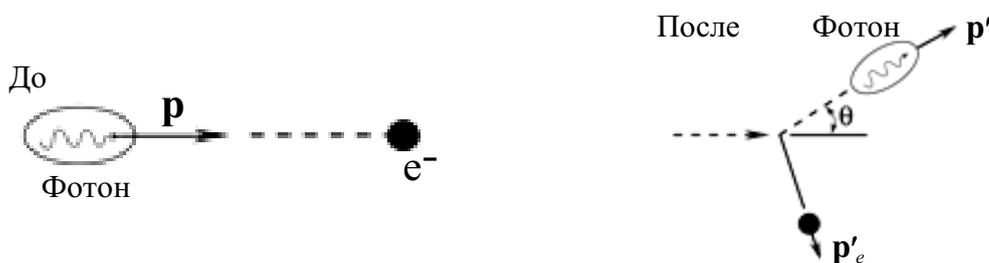


Рис. 2.16. Эффект Комптона. Соударение фотона со свободным электроном

Импульс электрона отдачи равен \mathbf{p}'_e , а полная релятивистская энергия E'_e . Здесь используется релятивистская механика, поскольку скорость электрона может достигать значений, близких к скорости света. Воспользуемся законами сохранения энергии и импульса в системе фотон–электрон до и после соударения. Таким образом,

$$pc + m_0c^2 = p'_e c + E'_e,$$

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' = \mathbf{p}'_e.$$

Возводя обе части последнего равенства в квадрат –

$$p^2 - 2pp' \cos \theta + p'^2 = p_e'^2$$

– и вычитая последнее равенство из $(p - p' + m_0c)^2 = (E'_e/c)^2$, имеем

$$m_0^2c^2 - 2pp' + 2pm_0c - 2p'm_0c + 2pp' \cos \theta = \frac{E_e'^2}{c^2} - p_e'^2.$$

Правую часть здесь можно заменить на $m_0^2c^2$:

$$m_0^2c^2 - 2p'(p + m_0c - p \cos \theta) + 2pm_0c = m_0^2c^2,$$

откуда находим

$$p' = \frac{p}{1 + \frac{p}{m_0c}(1 - \cos \theta)}.$$

Воспользовавшись тем, что $p = h/\lambda$, получаем

$$\frac{1}{\lambda'} = \frac{1}{\lambda + \frac{h}{m_0c}(1 - \cos \theta)},$$

или

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos \theta) \quad (\text{эффект Комптона}).$$

Здесь $\lambda_c = h/(m_0c) = 2,426 \cdot 10^{-12} \text{ м} \approx 0,024 \text{ \AA}$ – комптоновская длина волны^{*)}. В своем опыте Комpton использовал рентгеновское излучение с известной длиной волны и обнаружил, что у рассеянных фотонов увеличивается длина волны в соответствии с предсказаниями по формуле $\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta)$.

В диапазоне энергий квантов 0,1...10 МэВ комpton-эффект является основным физическим механизмом энергетических потерь γ - излу-

^{*)} Чаще комптоновской длиной волны называют величину $\Lambda = \lambda_c/(2\pi) = \hbar/(m_0c)$. Для электрона $\Lambda \approx 3,9 \cdot 10^{-13} \text{ м}$, для протона $\Lambda \approx 2,1 \cdot 10^{-16} \text{ м}$.

чения при его распространении в веществе. Поэтому комптоновское рассеяние широко используется в исследованиях γ -излучения атомных ядер. Оно лежит в основе принципа действия некоторых гамма-спектрометров.

Обратный эффект Комптона (обратное комптоновское рассеяние). Если электроны, на которых упруго рассеивается электромагнитное излучение, релятивистские, то энергия (и импульс) фотонов будет увеличиваться за счет энергии (и импульса) электронов, то есть длина волны при рассеянии будет уменьшаться.

Определим изменение длины волны излучения при рассеянии на пучке релятивистских электронов, считая, что в результате упругого столкновения с фотоном электрон останавливается (рис. 2.17).

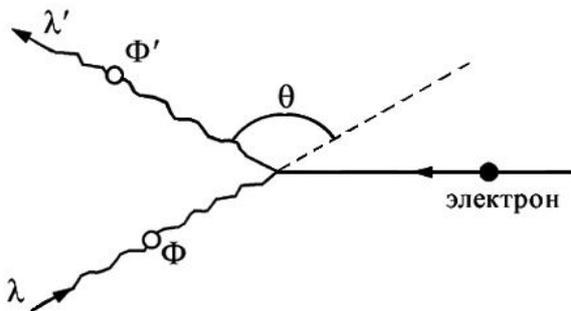


Рис. 2.17. Обратное комптоновское рассеяние

В системе отсчета, в которой после столкновения с фотоном электрон покоится, закон сохранения энергии записывается в виде

$$mc^2 + \frac{hc}{\lambda} = m_0c^2 + \frac{hc}{\lambda'}.$$

Поскольку сумма импульсов электрона и падающего фотона \mathbf{p}_ϕ должна быть равна импульсу рассеянного фотона \mathbf{p}'_ϕ , то из векторной диаграммы импульсов (рис. 2.18) следует, что

$$p_e^2 = p_\phi^2 + p_\phi'^2 - 2p_\phi p_\phi' \cos \theta,$$

или

$$(mv)^2 = \left(\frac{h}{\lambda}\right)^2 + \left(\frac{h}{\lambda'}\right)^2 - 2\frac{h^2}{\lambda\lambda'} \cos \theta.$$

Полученные соотношения переходят в соотношения эффекта Комптона при замене λ на λ' . Не повторяя выкладок, проведенных выше, запишем окончательную формулу для изменения длины волны обратного рассеянного излучения в виде

$$\lambda - \lambda' = \lambda_c(1 - \cos \theta).$$

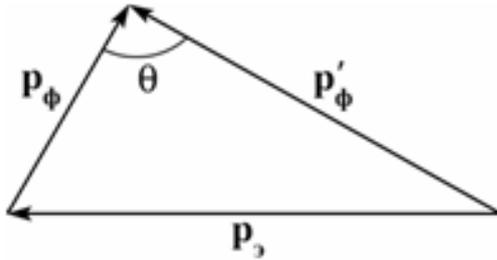


Рис. 2.18. Векторная диаграмма обратного комптоновского рассеяния

Из этой формулы следует, что длина волны рассеянного на электро-не излучения уменьшилась (!), так как при столкновении с движущимся релятивистским электроном фотон получает дополнительную энергию. Такой эффект получил название обратного комптон-эффекта. Именно обратным комптон-эффектом удается, в частности, объяснить рентгеновское излучение космических объектов.

Эффект Комптона, фотоэффект и множество других экспериментов с участием света и атомов подтвердили, что свет действительно ведет себя так, как если бы он состоял из частиц с энергией $h\nu$ и импульсом h/λ .

2.9. Корпускулярно-волновой дуализм

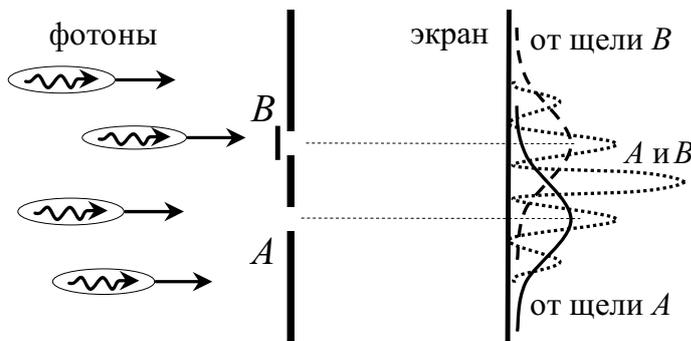
Если бы в экспериментах со светом сразу обнаружили эффект Комптона и фотоэффект, то физики были бы убеждены в том, что свет представляет собой поток частиц – фотонов. В этом случае наблюдение интерференционной картины от двух щелей должно было бы вызвать изумление, поскольку частицы не должны обнаруживать свойства, присущие классическим волнам. Частица может пройти только либо через одну, либо через другую щель. Интерференцию фотонов друг с другом можно исключить, уменьшив интенсивность света настолько, чтобы средний интервал времени между испусканием фотонов значительно превышал время пролета фотонов от источника света до экрана. Если экран удален от источника на 3 м, то время пролета составит $t = L/c = 10^{-8}$ с. Поэтому выберем интенсивность источника порядка 10^{-11} Вт, что соответствует испусканию менее 10^8 фотонов в секунду.

При закрытой щели B (рис. 2.19) получается распределение интенсивности, соответствующее одной щели A . Если открыта только щель B , то получается идентичная, сдвинутая картина. Если бы фотоны летели через щели как обычные частицы (одни через щель A , а другие – через щель B), то интенсивность возросла бы в 2 раза.

Однако, в случае когда открыты обе щели, распределение интенсивности света на экране не будет суммой распределений от каждой щели в отдельности (рис. 2.19). Возникает интерференционная картина Юнга от двойной щели. Полученный в опыте результат означает, что каждый фотон проходит через обе щели сразу.

Этот вывод становится еще более очевидным, если установить фотоэлемент в минимум дифракционной картины от двух щелей *A* и *B*. В этом случае фотоэлемент не регистрирует ни одного фотона. Если же мы закроем одну из щелей, то минимума на прежнем месте не окажется. Фотоны начнут попадать в фотоэлемент. Значит, фотоны «знают», открыты ли обе щели сразу или одна из щелей закрыта. В этих условиях говорить о том, что фотон прошел через какую-то одну щель, конечно, не имеет никакого смысла.

Таким образом, свет обладает одновременно свойствами, характерными как для волн, так и для частиц.



*Рис. 2.19. Распределение интенсивности, обусловленное фотонами, прошедшими через щель *A* (либо через щель *B*). Дифракционная картина от двух щелей *A* и *B**

В 1927 году, благодаря обнаружению волновых свойств у электрона, этот парадокс стал еще более значительным! В 1924 году Луи де Бройль в своей диссертации на соискание ученой степени доктора философии предположил, что не только для фотонов, но и вообще для всех частиц справедливы соотношения:

$$p = h/\lambda \quad \text{и} \quad E = h\nu.$$

Согласно гипотезе де Бройля, пучок частиц любого сорта будет создавать на подходящей двойной щели интерференционную картину, характерную для опыта Юнга. Три года спустя была обнаружена дифракция электронов на кристаллах, хотя казалось невозможным, чтобы электроны представляли собой в одно и то же время и частицы, и волны.

Наблюдаемый парадокс с одновременным проявлением у микрообъектов свойств волны и частицы можно устранить, предположив, что отдельный фотон после прохождения через щели *A* и *B* способен расще-

пляться и интерферировать с самим собой. Однако несоответствие классическим представлениям усиливается, если заменить пучок фотонов на пучок электронов. В природе никогда не наблюдалось половины или части электрона. Независимо от того, находится детектор за щелью A или B , электрон всегда обнаруживается целиком. В этом сущность атомизма, справедливого для всех элементарных частиц, включая фотоны. С этой точки зрения мы приходим к выводу, что отдельный электрон может пройти лишь через одну из двух щелей на рис. 2.20, a , $б$. Распределение электронов на экране должно быть суммой распределений для каждой из щелей в отдельности (2.20, $в$). Хотя логика эта кажется безукоризненной, распределение, характерное для $(A + B)$, не имеет места. Вместо этого мы видим стандартную интерференционную картину для двух щелей, изображенную на рис. 2.20, $г$.

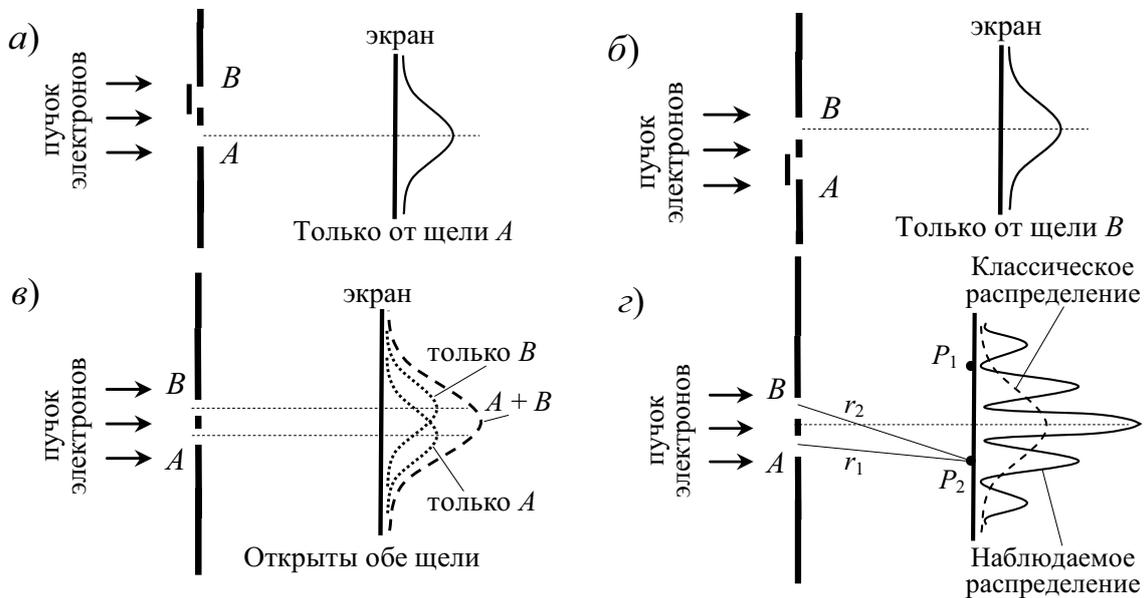


Рис. 2.20. Распределение интенсивности электронов на экране: только от щели A (a); только от щели B ($б$); от двух щелей согласно классической физике ($в$); от двух щелей согласно квантовой теории ($г$)

Предположим, что в точке P_1 на рис. 2.20, $г$ находится счетчик Гейгера, регистрирующий ежесекундно 100 электронов, когда открыта любая из щелей A или B . При этом, когда открыты обе щели одновременно, счетчик перестает регистрировать электроны. Это значит, что точка P_1 попадает в интерференционный минимум ($r_2 - r_1 = \lambda/2$). Если сначала открыть только щель A , а затем постепенно открывать щель B , то мы вправе ожидать, что скорость счета по мере открывания щели B будет постепенно увеличиваться от 100 до 200 отсчетов в секунду. Вместо этого наблюдается уменьшение скорости счета от 100 до нуля. Таким обра-

зом, открывание щели B может повлиять на электроны, которые, казалось бы, прошли через щель A . Более того, если счетчик Гейгера поместить в точку P_2 , то по мере открывания щели B скорость счета будет постепенно увеличиваться от 100 до 400 отсчетов в секунду, когда вторая щель полностью открыта. Таким образом, должно быть $100 + 100 = 400$, что возможно, если происходит сложение амплитуд $(10 + 10)^2 = 400$.

2.10. Волновая функция

Математический формализм, с помощью которого устраняется парадокс, ставит в соответствие каждой частице амплитуду вероятности $\psi(x, y, z, t)$, которая представляет собой функцию координат и времени. Вероятность обнаружить частицу в произвольный момент времени t в любой точке с координатами x, y, z пропорциональна $|\psi(x, y, z, t)|^2$, т. е. интенсивности. Квадрат модуля используют потому, что ψ , вообще, комплексная функция. Формально она обладает свойствами классических волн, и поэтому ее часто называют волновой функцией.

Если событие может произойти несколькими взаимно исключающими способами (как, скажем, при прохождении частицы через одну из щелей: A или B), то амплитуда вероятности этого события представляет собой сумму амплитуд вероятностей каждого из способов:

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 \text{ (принцип суперпозиции).}$$

Это утверждение совпадает с правилом сложения амплитуд волн в оптике. В рассмотренном выше примере ψ_1 описывает волну, проходящую через щель A , а ψ_2 — через щель B . На экране обе волновые функции перекрываются и дают классическую интерференционную картину от двух щелей, причем направление на n -максимум определяется выражением $\sin\theta_n = n\lambda/d$. Этот формализм составляет основу квантовой механики.

Интересно выяснить, какой механизм «прячется» за этим законом. Никому никакого механизма отыскать не удалось. Нет представлений о более фундаментальной механике, из которой можно вывести эти результаты.

Пусть в точке P (рис. 2.21) находится счетчик Гейгера, регистрирующий электроны. Амплитуда волны, прошедшей через щель A и достигшей точки P , в условных единицах равна $\psi_A = 2$, а в случае щели B мы имеем $\psi_B = 6$. Если открыта только щель A , то в точке P ежесекундно регистрируется 100 электронов.

Найдем:

1. Сколько электронов регистрируется каждую секунду, если открыта только щель B .
2. Если открыты обе щели и происходит конструктивная интерференция, то определим число каждую секунду регистрируемых электронов.
3. То же, но в случае деструктивной интерференции.

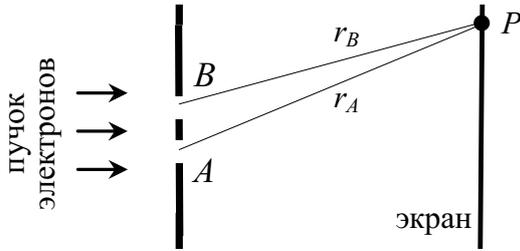


Рис. 2.21. Прохождение пучка электронов через две щели

В первом случае отношение интенсивностей волн: $\psi_B^2/\psi_A^2 = 36/4 = 9$. Следовательно, через щель B проходит каждую секунду в 9 раз больше частиц, чем через щель A , т. е. 900 электронов. Во втором случае полная амплитуда волны $\psi = \psi_A + \psi_B$, или $\psi = 8$. Поскольку $\psi^2 = 16\psi_A^2$, то в точке P будет регистрироваться 1600 электронов в секунду.

В третьем случае ψ_A и ψ_B должны иметь противоположные знаки, чтобы ослаблять друг друга. Следовательно, $\psi = 2 - 6 = -4$. Теперь $\psi^2 = 16$, т. е. в 4 раза больше ψ_A^2 . Это соответствует регистрации 400 электронов в секунду.

Рассмотрим распределение интенсивности в интерференционном опыте с двумя щелями, если щель B пропускает в 4 раза больше электронов, чем щель A . В этом случае $\psi_B^2 = 4\psi_A^2$ или $\psi_B = 2\psi_A$. Полная интенсивность в максимуме пропорциональна $(\psi_A + \psi_B)^2$ или

$$I_{\max} = (\psi_A + 2\psi_A)^2 = 9\psi_A^2.$$

Интенсивность в минимуме равна:

$$I_{\min} = (\psi_A - 2\psi_A)^2 = \psi_A^2.$$

Следовательно, отношение $I_{\max}/I_{\min} = 9$. Распределение интенсивности описывается выражением $I = I_A[5 + 4\cos k(r_A - r_B)]$, где r_A и r_B — расстояния от щелей A и B до точки P на экране (рис. 2.21).

Изложенный формализм порождает ряд вопросов, требующих дальнейшей физической интерпретации. Допустим, что мы выпускаем по одному электрону. Согласно волновым представлениям, каждому электрону сопоставляется цуг волн, или волновой пакет, расщепляющийся поровну между двумя щелями. Однако поместив за щелью A счетчик Гейгера, камеру Вильсона или иной детектор частиц, мы уви-

дим, что через щель никогда не проходит половины электрона. В этом сущность атомизма, который совместим с гипотезой о том, что интенсивность волны за щелью A характеризует вероятность найти электрон (целиком!) в этом месте. Если детектор поместить за щелью A , то интерференционная картина (рис. 2.20, z) исчезнет и получится классический результат (рис. 2.20, $в$).

Многие физики, включая Эйнштейна, пытались придумать такой опыт, в результате которого можно было бы, не нарушая интерференционной картины, установить, через какую именно щель прошла данная частица; однако все эти попытки потерпели неудачу. Один из таких экспериментов описан в примере п. 5.4, нашего курса «Оптика». В этом эксперименте нужно было установить, через какую щель проходят фотоны. Для этого можно менять ориентацию поляроида, расположенного у экрана. Однако всякий раз при соответствующем повороте поляроида картина интерференции на двух щелях будет превращаться в картину, характерную для одной щели. Но что же все-таки представляют собой «волны», отвечающие электронам? На этот вопрос следует ответить так же, как в случае фотонов. Электромагнитные волны свободно распространяются в пустом пространстве. В отличие от механических волн, в этом случае не существует среды, совершающей колебательное движение. Волновая функция ψ не является непосредственно наблюдаемой величиной, и в этом смысле ничто не совершает колебательного движения.

Проблемы квантовой механики решаются с математической точки зрения аналогично классическим волновым задачам. Классические волны и волны, отвечающие частицам, подчиняются математическим уравнениям одного и того же типа. Но в классическом случае амплитуда волны непосредственно наблюдаема, а ψ нет.

В 1926 г. Макс Борн так сформулировал вероятностный смысл волновой функции в квантовой механике:

Квадрат модуля волновой функции $\psi(x,y,z,t)$ определяет плотность вероятности w того, что в момент времени $t \geq 0$ частица может быть обнаружена в точке пространства $M = M(x,y,z)$ с координатами x, y и z :

$$w = \frac{dP}{dV} = |\psi|^2.$$

Вероятность того, что для заданного квантового состояния частицы в некоторый момент времени мы обнаружим частицу в элементарном объеме dV , окружающем точку M , равна

$$dP = |\psi|^2 dV = \psi^* \psi dV.$$

Вероятностный смысл волновой функции накладывает ограничения на волновые функции в задачах квантовой механики. Эти стандартные условия часто называют условиями регулярности волновой функции. Они включают в себя следующее.

1. Условие конечности волновой функции. Волновая функция не может принимать бесконечных значений, таких, что интегралы

$$P = \int_V |\psi|^2 dV \quad \text{или} \quad P = \int_V \psi^* \psi dV$$

станут расходящимися. Иными словами, волновая функция является квадратично интегрируемой. В частности, в задачах с нормированной волновой функцией квадрат модуля волновой функции должен стремиться к нулю на бесконечности.

2. Условие однозначности волновой функции. Волновая функция должна быть однозначной функцией координат и времени, поскольку плотность вероятности обнаружения частицы в каждой задаче определяется единственным образом. В задачах с использованием цилиндрической или сферической системы координат условие однозначности приводит к периодичности волновых функций по угловым переменным.
3. Условие непрерывности волновой функции. В любой момент времени волновая функция должна быть непрерывной функцией пространственных координат. Кроме того, непрерывными должны быть также частные производные волновой функции $d\psi/dx$, $d\psi/dy$, $d\psi/dz$.

Эти частные производные волновой функции лишь в редких случаях задач с идеализированными силовыми полями могут терпеть разрыв в тех точках пространства, где потенциальная функция, описывающая силовое поле, в котором движется частица, испытывает разрыв второго рода.

Принцип суперпозиции квантовых состояний — одно из важных свойств квантовых состояний, которое формально является следствием линейности уравнения Шрёдингера для волновой функции, которое будет обсуждаться в п. 3.6. Из линейности этого уравнения следует, что если частица может находиться в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией ψ_1 , а также в другом квантовом состоянии, описываемом волновой

функцией ψ_2 , то эта частица может также находиться в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2,$$

где C_1 и C_2 – в общем случае комплексные числа.

Можно говорить и о суперпозиции любого числа квантовых состояний, которая описывается волновой функцией:

$$\psi = C_1\psi_1 + C_2\psi_2 + \dots + C_n\psi_n = \sum_{n=1}^N C_n\psi_n.$$

В таком состоянии квадрат модуля коэффициента C_n определяет вероятность того, что при измерении, проведенном над системой с волновой функцией ψ , мы обнаружим ее в квантовом состоянии, описываемом волновой функцией ψ_n . Для нормированных волновых функций

$$\sum_{n=1}^N |C_n|^2 = 1.$$

Квантово-механический принцип суперпозиции состояний не имеет аналога в классической механике. В классической теории свободная частица в данный момент времени движется в пространстве в одном направлении.

Квантовая частица, состояние которой описывается волновой функцией, являющейся суперпозицией двух плоских волн де Бройля^{*)},

$$\psi(x, t) = \left(C_1 e^{\frac{i}{\hbar} px} + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar} px} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$$

одновременно движется и вправо вдоль оси x , и влево. С точки зрения классической механики такой ответ абсурден. С позиций квантовой механики это означает, что при проведении серии опытов по обнаружению направления движения частицы, находящейся в таком квантовом состоянии, с вероятностью $P_1 \sim |C_1|^2$ будет получен ответ, что частица движется вправо вдоль оси x , а с вероятностью $P_2 \sim |C_2|^2$ – что частица движется влево.

Точно так же в состоянии, являющемся суперпозицией двух плоских волн де Бройля, распространяющихся в направлениях вдоль осей x и y , когда

^{*)} Распространение света с частотой ω и волновым вектором $k = 2\pi/\lambda$ описывается плоской волной $\psi(x, t) = C \cdot e^{-i(\omega t - kx)}$. Если заменить ω и k , используя формулы квантовой физики $E = \hbar\omega$ и $p = \hbar k$, то получим выражение для плоской волны де Бройля. Волны де Бройля распространяются, интерферируют и дифрагируют по обычным оптическим законам.

$$\psi(x, y, t) = \left(C_1 e^{\frac{i}{\hbar} px} + C_2 e^{-\frac{i}{\hbar} py} \right) e^{-\frac{i}{\hbar} Et},$$

нет однозначного ответа на вопрос, куда движется частица. Движение частицы в направлении оси x и в направлении оси y не означает, что она движется вдоль биссектрисы угла между осями x и y . Это движение происходит с некоторой вероятностью вдоль оси x , а с некоторой вероятностью — вдоль оси y . Этот результат будет получен в серии измерений направления движения частицы.

Столь необычный ответ квантовой механики, казалось бы, на простой вопрос не является чисто теоретическим абстрактным результатом. В современных информационных технологиях, разрабатывающих квантовые компьютеры, возможно использование логического элемента не только с двумя состояниями «0» и «1», но и элементов, которые могут находиться в состояниях суперпозиции нуля и единицы с некоторыми вероятностями. Такие элементы существенно изменяют принцип работы компьютера и позволяют создавать алгоритмы, значительно повышающие быстродействие и эффективность переработки информации.

Возможность состояний, где данная физическая величина не имеет определенного значения и которые получаются суперпозицией состояний с определенным значением этой величины, является характерной чертой квантовой механики, принципиально отличающей ее от классической механики. Описать такое «смешанное» состояние одной частицы на языке классической механики невозможно.

2.11. Дифракция электронов

Эксперимент по дифракции электронов на двух щелях сложно осуществить, поскольку характерная длина волны электронов оказывается много меньше длин волн видимого света. Подлинную картину интерференции электронов на двух щелях удалось зафиксировать на фотопластинки в эксперименте, выполненном К. Йенссоном в 1961 г. Схема этого эксперимента приведена на рис. 2.22, а полученные результаты воспроизведены на рис. 2.23, а.

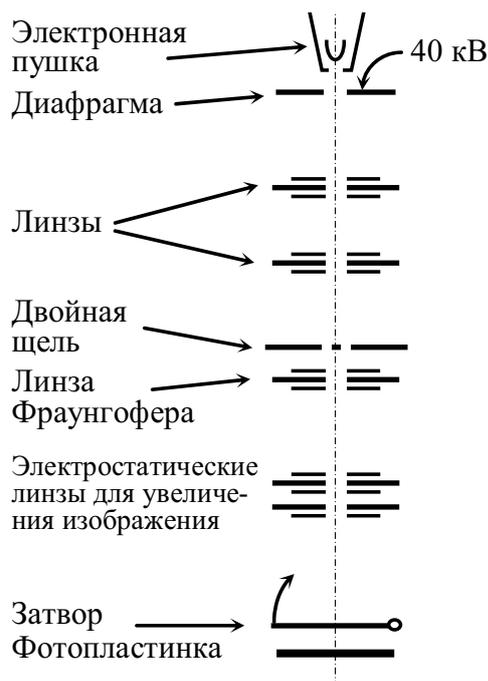


Рис. 2.22. Экспериментальная установка Йенссона для наблюдения интерференционной картины от двух щелей в случае электронов

В том месте, где электрон попадает на пластинку, образуется черное пятно. Приведенная фотография – это результат попадания большого числа электронов от двойной щели. Для сравнения на рис. 2.23, б показано изображение, полученное при интерференции света на двух щелях.

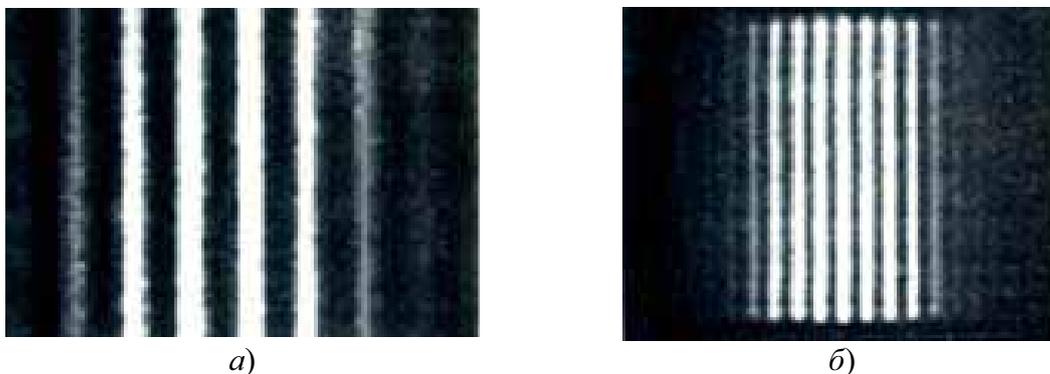


Рис. 2.23. Интерференционная картина от двух щелей для электронов. Каждое из зёрен негатива образовано отдельным электроном (а); б – для сравнения приведена интерференционная картина от двух щелей для света. На этом фото каждое из зёрен негатива образовано отдельным фотоном

С помощью генератора случайных чисел, удовлетворяющих распределению вероятностей вида $\sin^2 x$, можно смоделировать распределение на рис. 2.23, а, полученное в условиях малой интенсивности. На рис. 2.24, а воспроизведено попадание 27 электронов на фотопластинку. Рис. 2.24, б и в отвечают попаданию 70 и 735 электронов, соответственно.

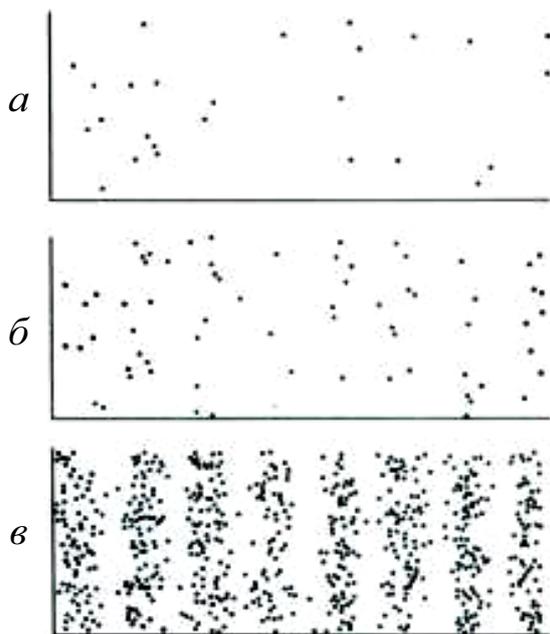


Рис. 2.24. Результаты моделирования эксперимента с двумя щелями. Распределения отвечают экспозициям с малым числом электронов: а – 27 электронов; б – 70 электронов; в – 735 электронов

Гипотеза де Бройля впервые была подтверждена на опыте двумя американскими физиками К. Дэвиссоном и Л. Джермером, наблюдавшими в 1927 г. различные типы дифракции электронов. Они не ставили своей целью поиски дифракции электронов. В 1926 году К. Дэвиссон представил на Международной конференции в Оксфорде некоторые полученные им предварительные данные.

Европейские ученые обратили его внимание на то, что эти результаты можно скорее интерпретировать как дифракцию электронов, нежели классическое рассеяние, которое он изучал. Спустя несколько месяцев Дэвиссон и Джермер получили результаты, которые недвусмысленно демонстрировали волновую природу электронов и позволили определить величину постоянной Планка с точностью около 1 %. Они исследовали рассеяние медленных электронов от поверхности монокристалла Ni.

Классическая физика рассматривает электроны как частицы. В лабораторных условиях движение электрона в электрических и магнитных полях согласуется с предсказаниями классической механики для движения точечного заряда. Только после проведения опытов, в которых имело место взаимодействие электронов с атомами, стала ясна неприменимость классической механики в этой области.

В решающем эксперименте, проведенном Дэвиссоном и Джермером, моноэнергетический пучок электронов попадал на мишень из монокристалла никеля. Ток электронов, отраженных от мишени, определялся как функция энергии налетающих электронов, угла вылета и ориентации кристалла. Этот эксперимент показал, что электроны при

наличии подходящей кристаллической решетки испытывают дифракцию подобно волнам. Схема опыта Дэвиссона и Джермера показана на рис. 2.25. Электронная пушка S , мишень (монокристалл никеля) и детектор D заключены в откачанную колбу. Детектор может вращаться так, что угол φ принимает различные значения.

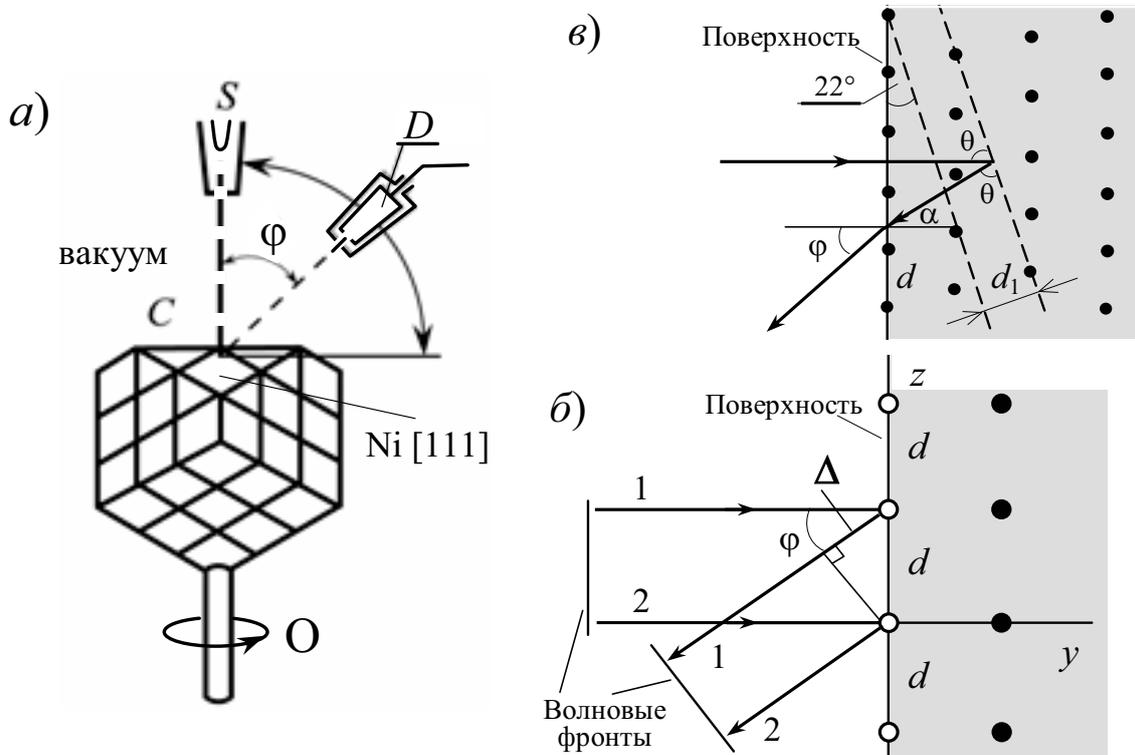


Рис. 2.25. Схема опыта Дэвиссона и Джермера. Электроны внутри детектора D задерживаются полем и в измеряемый ток вносят вклад только электроны, рассеянные с пренебрежимо малой потерей энергии (а). Интерференция отражений от поверхностных атомов никеля (б). Интерференция Брегга отражений от атомных плоскостей внутри кристалла никеля (в)

Если исходить из классической теории, то следует ожидать, что электроны будут рассеиваться на кристалле никеля, и некоторые из них попадут в детектор. Ток через детектор определяется углом рассеяния φ и ускоряющим напряжением U , но нет оснований ожидать сильной зависимости тока от этих параметров. Электроны с любой кинетической энергией $E = eU$ должны отклоняться на всевозможные углы. Многие из них при рассеянии должны потерять значительную долю своей энергии (неупругое рассеяние), но эти электроны не попадут в детектор D , у которого потенциал относительно катода подобран так, что заметная потеря энергии электроном препятствует его попаданию на детектор.

Результаты этого эксперимента представлены на рис. 2.26 в полярных координатах зависимости тока отраженных электронов от угла φ , определяющего положение цилиндра Фарадея при различных значениях кинетической энергии E электронов. На обычный фон рассеяния накладывается пик тока отраженных электронов, что совершенно неожиданно с точки зрения классической теории.

При $E = 44$ эВ (рис. 2.26, а) дифракционный максимум под углом $\varphi = 50^\circ$ только начинает формироваться, при $E = 54$ эВ (рис. 2.26, в) он достигает максимальной интенсивности, а при дальнейшем возрастании E (рис. 2.26, г, д) опять ослабляется вплоть до полного исчезновения. Это отражение явно избирательно как по углу, так и по энергии (рис. 2.26, е). Обе эти формы избирательности — это как раз то, чего следовало ожидать, если бы электроны обладали свойствами волн.

Действительно разным значениям энергии E соответствуют разные длины волн (де Бройля) частиц:

$$\lambda_B = h/p = h/\sqrt{2mE} = h/\sqrt{2meU}.$$

Если E измеряется в электронвольтах, то для электронов $\lambda_B = \sqrt{150,4/E}$ Å. Максимальное отражение электронов наблюдалось при кинетической энергии $E = 54$ эВ, что соответствует длине волны

$$\lambda_B = \sqrt{150,4/E} = \sqrt{150,4/54} = 1,67 \text{ Å}.$$

Таков же порядок величины межатомного расстояния в кристалле никеля, и естественно объяснить селективное отражение как дифракцию волн этой длины волны на трехмерной решетке, образованной атомами никеля. Электроны низкой энергии сильно рассеиваются атомами и проникают в кристалл лишь на несколько атомных слоев (рис. 2.25).

Начнем с рассмотрения одного поверхностного слоя атомов, который определяет главный вклад в отражение (рис. 2.25, б). Ряды атомов, расположенных на расстоянии d друг от друга, приводят к такой же дифракции, как и от зеркальной дифракционной решетки, обычно используемой в спектрографах для видимого света.

«Конструктивная» (усиливающая) интерференция волн, рассеянных различными рядами атомов, происходит при условии, когда разность хода $\Delta = d\sin\varphi$ равна кратному числу длин волн де Бройля $\lambda_B = h/p$, т. е. $d\sin\varphi = n\lambda_B$, где n — целое число.

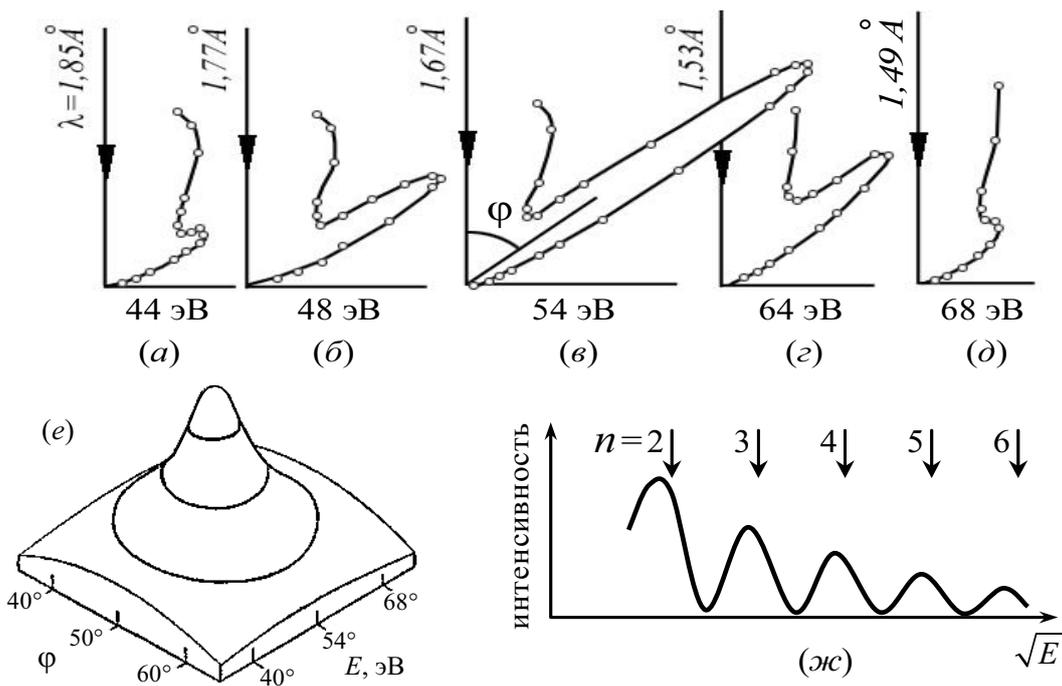


Рис. 2.26. Динамика дифракционного отражения электронов при изменении кинетической энергии E в полярных координатах (а–д). Ток на детекторе в функции угла φ и кинетической энергии электронов E (е). Интенсивность рассеянных электронов при фиксированном угле φ (или θ), но при различных значениях энергии E (ж). Стрелки указывают расчётные положения максимумов

Из опытов с рентгеновскими лучами установлено, что для указанной ориентации кристалла никеля d равно $2,15 \text{ \AA}$, и $\lambda_B = 2,15 \cdot \sin 50^\circ = 1,65 \text{ \AA}$, что превосходно согласуется с гипотезой де Бройля.

Это неполный анализ, так как если бы происходила только поверхностная дифракция, то максимумы отражения наблюдались бы и для других комбинаций λ_B и φ . Иначе говоря, получался бы гребень вдоль кривой $d \sin \varphi = n \lambda_B$ (где λ_B связана с E соотношением $\lambda_B = h / \sqrt{2mE}$), а не пик, как на рис. 2.26, е.

Роль атомов, расположенных под поверхностью, проиллюстрирована рис. 2.25, в. Электроны, падающие перпендикулярно поверхности, ускоряются при прохождении через потенциальный барьер (см. рис. 2.13). Когда они покидают кристалл, компоненты их скорости, нормальные к поверхности, уменьшаются, а компоненты, параллельные поверхности, остаются неизменными. Таким образом, выходящие электроны испытывают преломление. Чтобы угол отражения был равен углу падения для плоскостей, показанных на рисунке, элек-

троны должны испытать отклонение: от $\alpha = 44^\circ$ относительно нормали внутри кристалла до $\varphi = 50^\circ$, наблюдаемое вне кристалла.

Согласно условию дифракции Вульфа–Брэгга, угол падения равен углу отражения (т. е. отражение является зеркальным). Следовательно, условие эффективного зеркального отражения запишется для $n = 1$ в виде $\lambda_B = 2d_1 \sin \theta$, где θ – угол скольжения. Отражение (рис. 2.25, в) происходит от плоскостей, расположенных на расстоянии $d_1 = 0,81 \text{ \AA}$ друг от друга, когда $\lambda_B = 1,62 \cdot \sin \theta$. Поскольку $\theta = 68^\circ$, то $\lambda_B = 1,50 \text{ \AA}$. Из наблюдаемого преломления выходящих волн следует, что энергия электрона внутри кристалла на $\Delta E = 13 \text{ эВ}$ больше, чем вне его. Длина волны де Бройля для электрона внутри кристалла равна

$$\lambda_B = \sqrt{150,4/(E + \Delta E)} = \sqrt{150,4/(54 + 13)} = 1,498 \text{ \AA},$$

что находится в согласии с экспериментом.

Подобное согласие было получено Дэвиссоном и Джермером в широком интервале изменения значений λ_B , n , d и E . Даже поправка на преломление (часто очень маленькая) не менялась для различных ориентаций кристалла и энергий электронов E . Во всех экспериментах электроны вели себя как волны $\lambda_B = 2d_1 \sin \theta$ и испытывали дифракцию на кристаллической решетке.

Если в условие Вульфа–Брэгга $2d \sin \theta = n \lambda_B$ подставить длину волны де Бройля $\lambda_B = h/\sqrt{2mE}$, то найдем, что максимумы интенсивности отраженных электронов на рис. 2.26, ж должны наблюдаться при

$$\sqrt{E} = n \frac{h}{\sqrt{8m} \cdot d \sin \theta}.$$

Одинаковые расстояния между пиками интенсивности на рис. 2.26, ж (стрелки указывают расчетные положения максимумов 2-го, 3-го и т. д. порядков) свидетельствуют о том, что волновая картина правильно описывает рассеяние электронов^{*)}.

Это совпадение экспериментальных и расчетных значений λ_B служит подтверждением гипотезы де Бройля о наличии у частиц волновых свойств.

^{*)} На самом деле есть небольшое расхождение между экспериментальными значениями E , для которых на рис. 2.26, ж наблюдаются максимумы интенсивности, и теоретическими значениями E . Это расхождение возникает из-за того, что при выводе формулы не учтен показатель преломления волн де Бройля, который, как было показано выше, несколько отличается от единицы.

Опыт Дэвиссона и Джермера является примером истинно научного подхода. Если экспериментатор, пусть даже случайно, обнаружит непонятный ему эффект, то следует тщательно разобраться в нем, пока не будет достигнута полная ясность.

Английский физик Томпсон также систематически исследовал дифракцию электронов. В его экспериментах электроны с высокой энергией пропускались через тонкую металлическую фольгу. Длина волны рентгеновских лучей в опытах Томпсона была почти та же, что и длина волны де Бройля у электронов. И Томпсон надеялся получить картину дифракции электронов, сходную с уже известной дифракционной картиной рентгеновского излучения. В 1928 году он получил ряд дифракционных картин для электронов, весьма похожих на дифракцию рентгеновских лучей.

В настоящее время подробно изучены дифракционные картины, создаваемые не только электронами, но и нейтронами, протонами и даже атомами. В качестве примера на рис. 2.28, б приведена дифракционная картина, создаваемая нейтронами, отраженными от монокристалла NaCl. Волновая природа вещества сейчас твердо установлена и все стороны проверена. Никаких отклонений от теории пока обнаружить не удалось.

Определим, на какую кинетическую энергию должен быть рассчитан ускоритель заряженных частиц с массой покоя m_0 , чтобы с их помощью можно было исследовать структуры с линейными размерами $l = 10^{-15}$ м, что соответствует характерному размеру атомных ядер.

Для исследования структуры с линейными размерами l с помощью частиц необходимо, чтобы длина волны этих частиц λ_B была меньше или порядка l , т. е. $\lambda_B < l$. Поскольку данное в условии задачи значение l очень мало, то ясно, что иметь длину волны де Бройля, сравнимую с l , может только релятивистская частица. В случае, когда скорость частицы сравнима со скоростью света в вакууме c , связь между импульсом и кинетической энергией частицы определяется соотношением

$$p = \frac{1}{c} \sqrt{E_K (E_K + 2m_0 c^2)}.$$

Подставляя это выражение в $\lambda_B = h/p$, получаем

$$\lambda_B = \frac{hc}{\sqrt{E_K (E_K + 2m_0 c^2)}}.$$

Из условия $\lambda_B \leq l$, имеем

$$E_K^2 + 2m_0c^2E_K - (hc/l)^2 \geq 0.$$

Данное неравенство приведем к виду:

$$E_K^2 + 2m_0c^2E_K - \left(m_0c^2 \frac{\lambda_c}{l}\right)^2 \geq 0,$$

где $\lambda_c = h/(m_0c)$ – комптоновская длина волны частицы.

С учетом того, что $E_K > 0$, находим

$$E_K \geq m_0c^2(\sqrt{1 + (\lambda_c/l)^2} - 1).$$

Для электрона комптоновская длина волны $\lambda_{ce} = 2,426 \cdot 10^{-12}$ м, а энергия покоя $m_e c^2 = 0,51$ МэВ. Ускоритель электронов должен быть рассчитан на энергию $E_K^e \approx 2,43 \cdot 10^3 m_e c^2 \geq 1,24$ ГэВ.

Для протонов комптоновская длина волны $\lambda_{cp} = 1,32 \cdot 10^{-15}$ м, энергия покоя $m_p c^2 = 938,3$ МэВ, $E_K^p \approx 0,656 m_p c^2 \geq 0,62$ ГэВ.

Эффект Рамзауэра. В 1921 году немецкий физик К. Рамзауэр, исследуя упругое рассеяние электронов на атомах аргона, обнаружил явление, являющееся электронным аналогом известного в оптике пятна Пуассона.

Рамзауэр изменял поперечное сечение упругого рассеяния электронов на атомах аргона при энергии электронов E от долей электронвольта до нескольких десятков электронвольт. Сечение упругого рассеяния электронов определяется выражением

$$\sigma = N/(nv),$$

где N – число актов упругого рассеяния электронов на атомах аргона в единицу времени; n – плотность электронов в пучке, а v – их скорость.

Сечение σ имеет размерность площади, оно представляет собой площадь мишени вокруг атома, попадая в которую, электрон испытывает упругое рассеяние. Сечение зависит от энергии электронов. Чем больше скорость электрона v , тем меньше угол, на который он отклоняется при взаимодействии с атомом. Это означает, что при уменьшении энергии (скорости) электронов сечение упругого рассеяния должно увеличиваться.

Качественный вид результатов измерения Рамзауэра приведен на рис. 2.27. Для энергий электронов, превышающих 16 эВ, сечение рассеяния σ возрастает с уменьшением E в соответствии с предсказаниями классической теории. Однако при дальнейшем уменьшении E картина качественно меняется. При E меньше 16 эВ сечение рассеяния убывает с уменьшением E и при $E \approx 1$ эВ сечение σ практически обращается в

нуль. При дальнейшем уменьшении энергии электронов сечение рассеяния вновь возрастает.

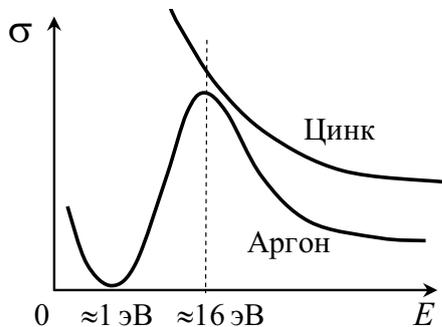


Рис. 2.27. Эффект Рамзауэра. Качественная зависимость сечения упругого рассеяния электронов на атомах аргона от энергии электронов. Электрон с энергией $\approx 1 \text{ эВ}$ проходит сквозь атомы аргона почти без рассеяния (в отличие от рассеяния на атомах цинка)

Обращение σ в нуль означает, что атомы аргона становятся как бы прозрачными для электронов, т. е. электрон проходит через атом аргона, не рассеиваясь на нем. Этот экспериментальный результат, несовместимый с представлениями классической физики, находит свое объяснение при учете волновой природы электрона.

Из оптики известно, что при дифракции на непрозрачном диске в центре геометрической тени может существовать яркое пятно, называемое пятном Пуассона. В опыте Рамзауэра диском служил атом аргона. Если энергия электрона была такова, что его длина волны де Бройля становилась сравнима с диаметром атома, то в результате дифракции электрона на атоме возникало пятно Пуассона для электронной волны. Электроны, проходя через атом аргона, не испытывают отклонения от направления своего первоначального движения. Подобное явление обнаружено и для атомов других инертных газов — криптона и ксенона.

Эффект Рамзауэра наблюдается только в инертных газах, поскольку атомы инертных газов имеют полностью заполненную, сферически симметричную внешнюю электронную оболочку и обладают достаточно резкой внешней границей.

2.12. Опыты с нейтронами и пучками частиц

Согласно гипотезе де Бройля, волновыми свойствами должны обладать не только электроны, но и другие микрочастицы — атомы, ионы, молекулы, а также открытые позже электрона такие элементарные частицы, как протоны, нейтроны и т. д. В сравнении с электроном эти частицы являются тяжелыми. Их масса в тысячи раз превосходит массу электрона. Поскольку длина волны де Бройля $\lambda_b = h/(mv)$ обратно пропорциональна массе частицы m , то при одинаковых скоростях длина волны де Бройля тяжелых частиц оказывается существенно меньше длины волны электрона. Для наблюдения дифракции тяжелых частиц на кристаллах необходимо, чтобы их длина волны была сравнима с межплоскостным расстоянием в кристалле ($\sim 10^{-10}$ м), а это оказывается возможным только в случае медленных частиц.

Совершенствование техники эксперимента позволило наблюдать дифракцию на кристаллах тяжелых частиц, например атомов гелия и молекул водорода. Особенность этих опытов заключалась в том, что дифрагировавшие атомы и молекулы из-за малой скорости не могли проникнуть вглубь кристалла и испытывали дифракцию на двумерной решетке, образованной атомами кристалла на его поверхности.

Большое значение имело проведение дифракционных опытов с нейтронами. У нейтронов нет электрического заряда, и поэтому даже при малых скоростях они могут свободно проникать в кристалл и дифрагировать на трехмерной пространственной кристаллической решетке. Источниками нейтронов являются ядерные реакции. Интенсивный пучок нейтронов для проведения дифракционных исследований может быть получен от ядерных реакторов или на ускорителях заряженных частиц.

Испытывать дифракцию в кристалле могут только, так называемые, тепловые нейтроны, т. е. нейтроны, энергия которых сравнима с энергией молекул газа $E = 1,5kT$ при комнатной температуре $T \sim 300$ К. У тепловых нейтронов с энергией $E = p^2/(2m_n)$, где m_n — масса нейтрона, длина волны де Бройля —

$$\lambda_b = h/p = h/\sqrt{2m_n E}$$

— имеет порядок 10^{-10} м = 1 Å, что делает возможным наблюдение дифракции нейтронов на кристаллической решетке.

Первые исследования дифракции нейтронов на кристаллах были выполнены в 1936 г. Х. Хальбаном, П. Прайссерком и Д. Митчеллом. Они использовали радио-бериллиевые источники

нейтронов. В дальнейшем источником нейтронов стал служить ядерный реактор (рис. 2.28). Нейтроны от ядерного реактора R проходят через замедлитель S и теряют в нем часть своей энергии, что приводит к увеличению длины волны λ_B . В коллимирующей системе K формируется узконаправленный пучок нейтронов. Они попадают на кристалл C , выполняющий роль дифракционной решетки. Дифрагировавшие нейтроны регистрируются детектором нейтронов D .

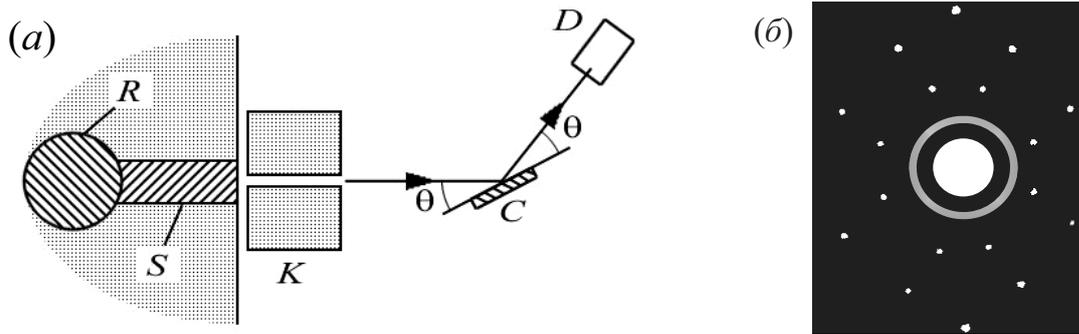


Рис. 2.28. Установка для наблюдения дифракции нейтронов (а). Дифракционная картина, создаваемая нейтронами, рассеянными кристаллом $NaCl$ (б)

Зависимость интенсивности дифрагировавших нейтронов от величины угла Брэгга θ и длины волны де Бройля λ_B приведена на рис. 2.29.

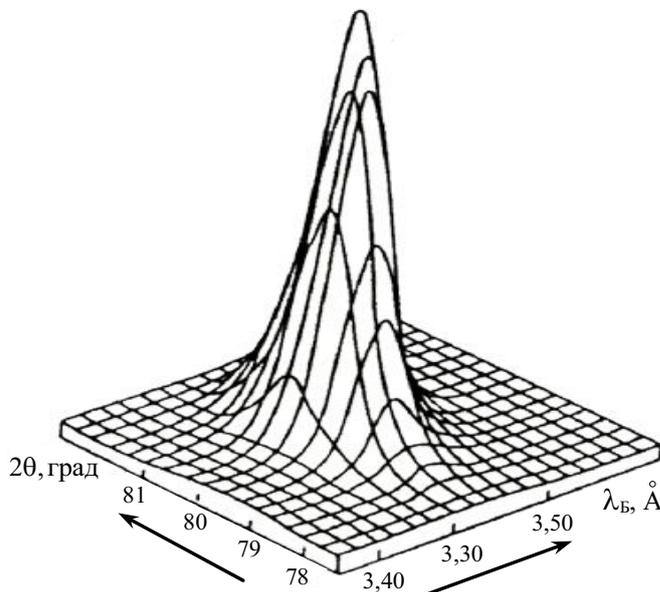


Рис. 2.29. Дифракционный максимум интенсивности нейтронов, отражённых от монокристалла $CsHSeO_4$ (распределение интенсивности в одном из «пятнышек» на дифракционной картине, аналогичной рис. 2.28, б)

В качестве замедлителя нейтронов используются большие поликристаллические образцы графита, бериллия, висмута и других веществ, ядра которых слабо поглощают нейтроны. В замедлителе нейтроны испытывают многократное дифракционное отражение и отдают избыток своей энергии ядрам кристалла.

Кроме того, в замедлителе происходит выделение низкоэнергетической части спектра нейтронного пучка (фильтрация), также основанное на дифракции нейтронов.

Из условия Вульфа–Брэгга –

$$2d \sin \theta_B = n \lambda_B$$

– следует, что максимальная длина волны нейтронов, которые могут испытывать дифракционное отражение, равна для первого порядка интерференции ($n = 1$):

$$\lambda_B^{\max} = \max(2d \sin \theta_B) \leq 2d.$$

Эту длину волны λ_B^{\max} называют граничной длиной волны и обозначают $\lambda_{\text{тр}}$. Наиболее быстрые нейтроны с длиной волны $\lambda < \lambda_{\text{тр}}$ будут испытывать дифракцию в кристалле, отклоняться за счет этого от своего первоначального направления и выбывать из проходящего пучка (рис. 2.30).

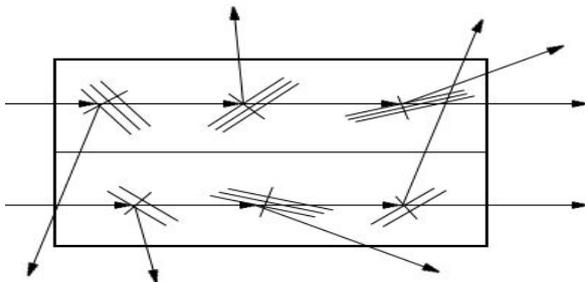


Рис. 2.30. Фильтрация нейтронного пучка поликристаллом

Медленные нейтроны с длиной волны $\lambda > \lambda_{\text{тр}}$ не испытывают дифракцию и проходят через поликристалл практически без изменения интенсивности пучка. Зависимость интенсивности пучка нейтронов, прошедших через бериллиевый фильтр, от длины волны λ представлен на рис. 2.31. Минимум интенсивности прошедшего пучка соответствует длине волны нейтронов $\lambda \approx 4 \text{ \AA}$ и согласуется со значением граничной длины волны для бериллиевого фильтра: $\lambda_{\text{тр}} = 3,95 \text{ \AA}$.

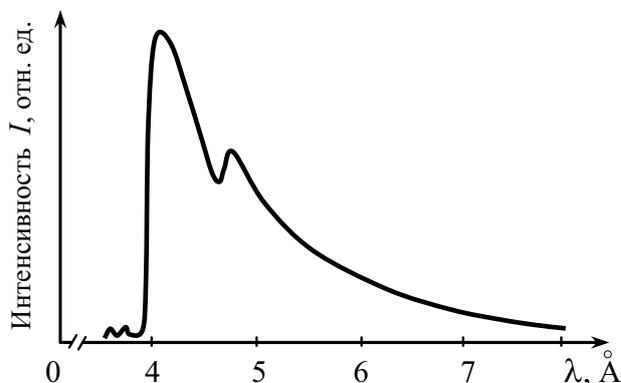


Рис. 2.31. Спектр нейтронов, прошедших через поликристаллический бериллиевый фильтр

Проходящие через поликристаллический фильтр нейтроны низких энергий получили название холодных нейтронов. Оценка температуры этих нейтронов поясняет такое название. Определим температуру T нейтронов, пропускаемых поликристаллом графита, постоянная решетки которого $d = 3,35 \text{ \AA}$.

Граничная длина волны нейтронов, пропускаемых графитом, $\lambda_{\text{гр}} = 2d = 6,7 \text{ \AA}$. Поскольку $\lambda_{\text{б}} = h/\sqrt{2m_n E} = h/\sqrt{3m_n kT}$, находим

$$T = \frac{h^2}{3m_n k} \cdot \frac{1}{\lambda_{\text{б}}^2}.$$

Подставляя сюда $\lambda_{\text{б}} = \lambda_{\text{гр}} = 6,7 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, имеем

$$T = \frac{(6,62 \cdot 10^{-34})^2}{3 \cdot 1,675 \cdot 10^{-27} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot (6,7 \cdot 10^{-10})^2} \approx 14 \text{ К}.$$

Нейтронам, прошедшим через поликристаллический фильтр, соответствуют очень низкие температуры, поэтому их называют холодными нейтронами.

Основные выводы

Квантовая природа вещества качественно проявляется в том, что каждой частице присущи свойства волны и, наоборот, любые волны имеют свойства, характерные для частиц.

Нагретые тела являются источниками электромагнитного излучения в широком диапазоне частот. Это излучение называют тепловым излучением. Тепловое излучение, находящееся в равновесии с излучающим телом, является равновесным.

Энергия, испускаемая с единицы поверхности тела в единичном интервале частот, называется спектральной испускающей способностью тела или спектральной плотностью энергетической светимости. Испускающая способность является функцией частоты и температуры $r = r(\omega, T)$.

Спектральная поглощательная способность тела $a_{\omega, T}$ — безразмерная величина, характеризующая долю поглощенного телом потока излучения на частоте ω :

$$a_{\omega, T} = \frac{d\Phi'_{\omega}}{d\Phi_{\omega}}.$$

Абсолютно черное тело (АЧТ) – тело, у которого на всех частотах и при любых температурах поглощательная способность равна единице ($a_{\omega,T} \equiv 1$).

Закон Кирхгофа – отношение испускательной и поглощательной способностей одинаково для всех тел, включая абсолютно черное тело, и равно спектральной испускательной способности абсолютно черного тела:

$$r_{\omega,T}/a_{\omega,T} = r_{\omega,T}^*$$

Закон Стефана–Больцмана – энергетическая светимость абсолютно черного тела пропорциональна четвертой степени его абсолютной температуры:

$$R^* = \sigma T^4.$$

Закон смещения Вина – длина волны λ_m , на которую приходится максимум испускательной способности абсолютно черного тела, обратно пропорциональна его абсолютной температуре:

$$\lambda_m = \frac{b}{T}.$$

Формула Рэлея–Джинса для испускательной способности абсолютно черного тела –

$$r_{\omega,T}^* = \frac{\omega^2}{4\pi^2 c^2} kT$$

– хорошо согласуется с экспериментальными данными для излучения абсолютно черного тела в области малых частот или больших длин волн и резко расходится с опытом для больших частот или малых длин волн излучения – ультрафиолетовая катастрофа.

Планк предположил, что свет испускается отдельными порциями – квантами. Каждый квант света – фотон – имеет энергию $E = h\nu = \hbar\omega$.

С учетом гипотезы Планка средняя энергия теплового излучения определяется по формуле

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(kT)} - 1}.$$

Испускательная способность абсолютно черного тела или функция Планка ($r_{\omega,T}^* = cu_{\omega,T}/4$):

$$r_{\omega,T}^* = \frac{\hbar\omega^3}{4\pi^2 c^2} \cdot \frac{1}{e^{\hbar\omega/(kT)} - 1} \quad \text{или} \quad r_{\lambda,T}^* = \frac{2\pi\hbar c^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\hbar c/(\lambda kT)} - 1}.$$

Функция Планка соответствует результатам экспериментальных исследований излучения абсолютно черного тела на всех частотах и при всех температурах.

Эйнштейн дал объяснение фотоэффекту, предположив, что энергия электрона, выбитого фотоном с поверхности металла, может достигать $K_{\text{макс}} = h\nu - A_0$, где A_0 — работа выхода для данного металла. Работа выхода в конкретном металле зависит от глубины U_0 потенциальной ямы и максимальной кинетической энергии K_F электронов проводимости: $A_0 = U_0 - K_F$.

Пусть исходный фотон обладает длиной волны λ и импульсом $p = h/\lambda$. При столкновении фотона со свободным электроном часть его энергии и импульса передается электрону — длина волны фотона увеличивается, импульс и энергия уменьшаются — эффект Комптона. Из законов сохранения энергии и импульса имеем следующее соотношение для изменения длины волны фотона при рассеянии на электроне:

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\theta).$$

Не только для фотонов, но и для всех частиц справедливо соотношение $\lambda = h/p$ — гипотеза де Бройля. Волновая природа пучка электронов с импульсом p проявляется в интерференционной картине, которая возникает при прохождении пучком двойной щели.

Если на поверхность кристалла падает пучок электронов под углом скольжения θ , при котором наблюдается максимум интенсивности отраженного пучка, то условие Вульфа—Брэгга позволяет определить межатомное (межплоскостное) расстояние $d = n\lambda_B/(2\sin\theta)$, где $\lambda_B = h/\sqrt{2meU}$ — длина волны де Бройля электрона, ускоренного разностью потенциалов U .

Волновые свойства частицы можно описать с помощью волновой функции ψ . Вероятность найти частицу в любой момент времени t в любой точке пространства с координатами x, y, z пропорциональна интенсивности волны $|\psi(x, y, z, t)|^2$. Если событие может произойти несколькими взаимно исключающими способами, то амплитуда вероятности события будет равна сумме амплитуд вероятностей отдельных событий:

$$\psi = \sum_i \psi_i.$$

Упражнения

1. Какова длина волны (в ангстремах) фотона с энергией 1 МэВ?
2. Запишите выражение для инертной или релятивистской массы фотона через h , λ и c .
3. Если релятивистская масса фотона 10^{-15} г, то каков его импульс в системе СИ? Чему равна его длина волны?
4. Электрон и фотон имеют каждый кинетическую энергию 1 эВ. Каковы длины волн каждой из частиц?
5. Связь энергии с длиной волны фотона удобно записывать в виде $\lambda = K/E$. Найдите численное значение постоянной K , если λ измеряется в ангстремах, а E — в электронвольтах.
6. Выразите кинетическую энергию нерелятивистского электрона через его массу, длину волны и постоянную Планка h .
7. Каждый металл характеризуется порогом фотоэффекта λ_0 (излучение с длиной волны, превышающей λ_0 , не может вырвать электрон). Каково значение λ_0 в случае меди, если для нее работа выхода равна 4,4 эВ?
8. Пороговая чувствительность сетчатки человеческого глаза к желтому свету ($\lambda_{\text{ж}} = 590$ нм) составляет $1,7 \cdot 10^{-18}$ Вт. Какому числу ежесекундно попадающих на сетчатку фотонов это соответствует?
9. Выразите длину волны свободного электрона через E , h , m и c , где E — полная релятивистская энергия.
10. Напишите выражение для кинетической энергии релятивистского электрона через его длину волны.
11. Допустим, что в опыте с двумя щелями в некоторой точке экрана амплитуды волн, прошедших через щели A и B , равны, соответственно, $+3$ и $+5$, а скорость счета, если открыта только щель A , составляет 60 отсчетов в секунду.
 - а) Какова скорость счета, если открыта только щель B ?
 - б) Какова скорость счета, если открыты обе щели?
 - в) Какой будет скорость счета, если обе щели открыты, а амплитуды волн имеют разные знаки?
12. Предположим, что в опыте по дифракции электронов на трех одинаковых щелях детектор электронов расположен в точке, куда все три волны приходят в фазе.
 - а) Какова скорость счета от трех щелей, если каждая из них в отдельности обеспечивает 100 отсчетов в секунду?
 - б) Если интенсивность пучка от электронной пушки увеличится в 2 раза, во сколько раз возрастет скорость счета от трех щелей?
13. Во сколько раз изменится плотность потока фотонов, если удвоить и амплитуду, и частоту плоской электромагнитной волны [число фотонов/($\text{м}^2 \cdot \text{с}$)]?

Задачи

1. Электрон притягивается к электрически нейтральному куску металла. Силу притяжения можно представить в виде потенциальной ямы глубиной $-U_0$. Рассмотрим электрон с наибольшей энергией внутри металла (т. е. на уровне Ферми). Пусть эта энергия в металле равна $K = 6$ эВ. Поглотив фотон с энергией 7 эВ, электрон вылетает из металла с энергией $K = 5$ эВ. Будем считать, что электрон не испытывает столкновений с другими электронами.
 - а) Чему равна работа выхода в электронвольтах для этого металла?
 - б) Какова величина U_0 в электронвольтах?
 - в) Найдите отношение длины волны электрона после вылета из металла к длине волны до того, как он поглощает фотон?
2. Фотон с длиной волны λ сталкивается с покоящимся свободным электроном. После соударения длина волны фотона равна λ' , а направление его движения меняется на противоположное (угол рассеяния 180°).
 - а) Каким после соударения будет импульс электрона в зависимости от λ и λ' ?
 - б) Чему равна кинетическая энергия электрона после соударения? Приведите ответ для релятивистского случая, выразив его через λ и λ' .
3. Фотон с энергией $E \gg m_e c^2$ испытывает обратное рассеяние на покоящемся электроне. Чему равна (в МэВ) энергия фотона после рассеяния?
4. Фотон с энергией $E \gg m_p c^2$ испытывает обратное рассеяние на покоящемся протоне. Чему равна (в МэВ) энергия фотона после рассеяния?
5. Фотон с энергией 100 кэВ испытывает комптоновское рассеяние на угол 90° .
 - а) Какова его энергия после рассеяния?
 - б) Чему равна кинетическая энергия электрона отдачи?
 - в) Определите направление движения электрона отдачи.
6. Пусть E_0 – начальная энергия фотонов, испытывающих комптоновское рассеяние. Покажите, что кинетическая энергия электрона отдачи равна:

$$K = \frac{(1 - \cos \theta) E_0}{1 - \cos \theta + mc^2 / E_0}.$$

7. Допустим, что при комптоновском рассеянии угол между направлением движения налетающего фотона и направлением вылета электрона отдачи равен θ . Найдите выражение для θ через λ и λ' .
8. Тепловые нейтроны находятся в тепловом равновесии со средой при комнатной температуре. В этом случае $kT = 0,025$ эВ. Какова средняя кинетическая энергия теплового нейтрона? Чему равна длина волны нейтрона?
9. На две очень тонкие щели, расположенные друг от друга на расстоянии 10 мкм, падает пучок электронов с энергией 1 эВ. В 10 м от щелей находится экран. Каково расстояние между соседними минимумами на экране?
10. На рис. 2.25, б изображена поверхность кристалла с взаимно перпендикулярными цепочками атомов. Пусть расстояние между соседними атомами равно $1,5 \text{ \AA}$ по оси y и $2,0 \text{ \AA}$ по оси z . На поверхность кристалла падает пучок электронов с энергией 90 эВ. Расстояние от кристалла-мишени до экрана 10 см. На люминесцентном экране образуются пятна. Каково расстояние между точками по осям y и z ? В каких направлениях будут перемещаться эти точки при увеличении энергии электронов?

3. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

3.1. Волновые пакеты

Согласно гипотезе де Бройля, движущаяся частица обладает волновыми свойствами, и этими свойствами нельзя пренебречь, если длина волны де Бройля частицы λ_b сравнима или больше характерного размера L области движения частицы. Как показывают оценки, условие $\lambda_b \geq L$ выполняется для частиц малых масс, движущихся в областях, размеры которых сравнимы с размерами атомов.

Для описания движения микрочастицы, обладающей волновыми свойствами, не подходит способ, разработанный в классической механике, когда состояние частицы определяется заданием в любой момент времени ее пространственных координат и скорости (импульса). Движение частицы связано с изменением со временем ее механического состояния, а непрерывная смена состояний соответствует движению частицы по определенной траектории.

Наличие у микрочастицы волновых свойств делает невозможным одновременное точное определение координат и импульса микрочастицы. Следовательно, механическое состояние микрочастицы не может быть задано классическим способом, а представление о траектории движения микрочастицы принципиально не может быть использовано для описания ее движения.

Физическая теория, в которой описывается движение частиц, обладающих волновыми свойствами, первоначально получила название волновой механики. Однако это название вскоре было заменено другим названием — квантовая механика, так как оказалось, что волновая механика предсказывает дискретный характер, то есть квантование различных физических величин у движущихся микрочастиц. Название «квантовая механика» закрепилось за этой теорией.

Квантовая механика является более общей физической теорией, чем классическая механика. Однако при выполнении условия $\lambda_b \ll L$, когда волновыми свойствами частицы можно пренебречь, выводы квантовой механики совпадают с результатами классической механики. При существенном уменьшении пространственных масштабов движений микро-частиц, с которыми имеет дело атомная и ядерная физика, а также физика элементарных частиц, квантовая механика становится единственно возможным аппаратом описания явлений микромира. Отметим, однако, что хотя квантовые эффекты проявляются на уровне атомных систем, тем не менее, они определяют особенности работы многих современных установок и приборов и лежат в основе передовых технологий.

В основе квантовой механики лежит соотношение де Бройля $p = h/\lambda$. Однако импульс принято выражать не через длину волны λ , а через волновое число $k \equiv 2\pi/\lambda$:

$$p = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k.$$

Величина $h/2\pi$ встречается столь часто, что для нее введено специальное обозначение \hbar («аш» перечеркнутое):

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi},$$

$p = \hbar k$ — соотношение де Бройля.

Рассмотрим движущуюся вдоль оси x частицу, длина волны которой в точности равна λ_0 . Волновое число частицы $k_0 = 2\pi/\lambda_0$.

В качестве волновой функции следует взять $\psi = Ae^{i(k_0x - \omega t)}$. Сама ψ представляет собой волну, распространяющуюся в положительном направлении оси x . Распределение вероятностей обнаружить частицу —

$$|\psi|^2 = \psi * \psi = (Ae^{-i(k_0x - \omega t)})(Ae^{+i(k_0x - \omega t)}) = A^2$$

— не зависит от x и t — частица может быть обнаружена с равной вероятностью в любой точке на оси x (учтено, что $e^{ia} \cdot e^{-ia} = 1$). Использование комплексной волновой функции дает равномерное распределение вероятностей по оси x . Из формулы Эйлера —

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$$

— следует, что мнимая и действительная части функции φ являются монохроматическими волнами:

$$\begin{aligned} \text{Re}(\psi) &= A \cos(k_0x - \omega t), \\ \text{Im}(\psi) &= A \sin(k_0x - \omega t). \end{aligned}$$

Таким образом, если импульс частицы имеет определенное значение, то она с равной вероятностью может находиться в любой точке пространства. Иначе говоря, если импульс частицы точно известен, то мы ничего не знаем о ее местонахождении. Однако в большинстве физических ситуаций бывает известно, что частица находится в определенной области пространства.

Выясним теперь, какие волны следует сопоставлять частицам, наблюдаемым в обычных, классически поставленных опытах. Классические опыты всегда начинаются с того, что мы определяем положение частицы в некоторый момент времени $t = 0$. Пусть измерение координаты проделано с точностью Δx , т. е. мы однозначно определили, что частица находится между x_0 и $(x_0 + \Delta x)$. С точки зрения волновой (квантовой) теории это означает, что волновая функция частицы равна нулю во всем пространстве, кроме участка, заключенного между x_0 и $(x_0 + \Delta x)$ (рис. 3.1, *a*). Ясно, что такая функция не является одной монохроматической волной де Бройля типа

$$\psi(x) = Ae^{i(k_0x - \omega t)}.$$

Поскольку мы исследуем сейчас волновую функцию частиц в момент времени $t = 0$ зависимость волн де Бройля от времени является пока несущественной. Запишем отдельную волну в виде

$$\psi(x) = Be^{ik_0x}, \text{ где } B = Ae^{-i\omega t}.$$

Изображенная на рис. 3.1, *a* функция ψ может быть представлена по теореме Фурье как бесконечная совокупность монохроматических волн в интеграле Фурье:

$$\psi(x) = \int B(k)e^{ikx} dk.$$

Состояние частицы в начальный момент времени определяется наложением большого числа монохроматических волн, каждая из которых движется со своей скоростью (импульсом). Подобное наложение волн, имеющее один резко выраженный максимум, называется обычно волновым пакетом. Во всякий другой момент времени положение частицы описывается, грубо говоря, местоположением максимума ψ -функции.

Рассмотрим волновую функцию вида

$$\psi(x, 0) = A \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \cdot \exp(ik_0x),$$

в момент времени $t = 0$.

На рис. 3.1, б приведена действительная часть этой волновой функции, а на рис. 3.1, в показано соответствующее распределение вероятностей:

$$|\psi|^2 = A^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right).$$

Более чем в 50 % случаев частицу можно обнаружить в интервале от $x = -\sigma_x$ до $x = +\sigma_x$. Функция $\exp(-x^2/2\sigma_x^2)$ – это известное распределение Гаусса. Здесь σ_x – среднеквадратичное отклонение, которое назовем неопределенностью величины x и обозначим Δx . Локализованная волна называется волновым пакетом. Изображенная на рис. 3.1, б волна, естественно, не является точно монохроматической. Волновой пакет представляет сумму (суперпозицию) плоских монохроматических волн с близкими значениями частот (ω) и волновых векторов (k).

Для иллюстрации рассмотрим волновой пакет в момент времени $t = 0$ и подберем подходящую суперпозицию монохроматических волн типа $\exp(ik_n x)$. Для этого требуется найти коэффициенты B в выражении

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = \sum_{n=0}^{n=\infty} B_n \exp(ik_n x).$$

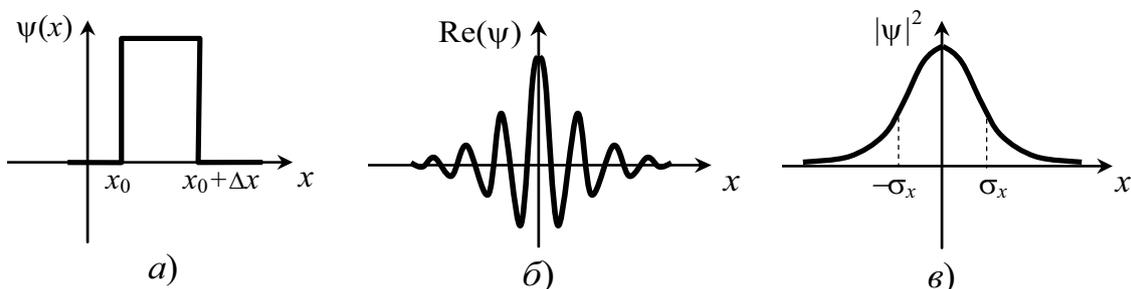


Рис. 3.1. Волновая функция частицы, определённой на интервале Δx (а).

Волновой пакет в виде распределения Гаусса: б – зависимость действительной части волновой функции от x ; в – зависимость квадрата модуля волновой функции или плотности вероятности от x

В сумме содержится бесконечное число слагаемых – монохроматических волн, и мы перейдем от суммирования к интегрированию:

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x) = \int B(k) \exp(ikx) dk.$$

Используя тождество

$$\exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \exp(ik_0 x) \equiv \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} \int \exp[-\sigma_x^2(k - k_0)^2] \exp(ikx) dk,$$

получаем

$$B(k) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} \exp[-\sigma_x^2 (k - k_0)^2].$$

Заменив k на p/\hbar , найдем коэффициент B в импульсном представлении:

$$B(p) = \frac{\sigma_x}{\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(p - p_0)^2}{(\hbar / \sigma_x)^2}\right].$$

3.2. Соотношение неопределенностей

На рис. 3.2 изображены распределения по импульсам для случая двух волновых пакетов различной ширины. Отметим, что чем уже волновой пакет, тем шире распределение по импульсам. Вероятность найти частицу в состоянии с волновой функцией $B(k) \cdot \exp(ikx)$ пропорциональна квадрату ее амплитуды. Вероятность различных значений импульса определяется функцией

$$|B(p)|^2 = \frac{\sigma_x^2}{\pi} \exp\left[-\frac{(p - p_0)^2}{2(\hbar / 2\sigma_x)^2}\right].$$

Распределение $|B(p)|^2$ является Гауссовым для p , и его можно переписать в виде

$$|B(p)|^2 = \frac{\sigma_x^2}{\pi} \exp\left[-\frac{(p - p_0)^2}{2\sigma_p^2}\right].$$

Здесь σ_p — среднеквадратичное отклонение или «неопределенность» величины p . Из двух последних соотношений следует

$$\sigma_p = \hbar / (2\sigma_x), \quad \sigma_p \sigma_x = \hbar / 2.$$

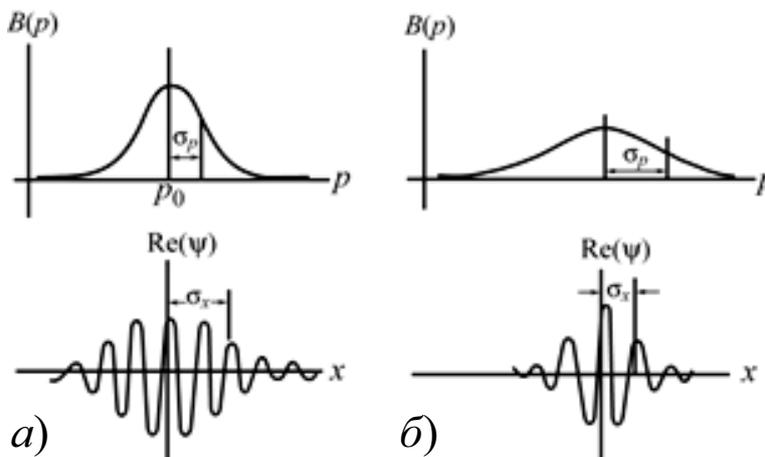


Рис. 3.2. Функция распределения $B(p)$ по импульсам (наверху) и соответствующий ей волновой пакет (внизу). Ширина волнового пакета (а) вдвое превышает его ширину (б). В обоих случаях произведение $\sigma_x \sigma_p$ имеет одинаковую величину

В случае волновой функции в виде распределения Гаусса произведение ширины волнового пакета на ширину функции распределения по импульсам равно $\hbar/2$. В других случаях это произведение может быть больше $\hbar/2$, но оно никогда не будет меньше $\hbar/2$. В общем случае имеем

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$$

— соотношение неопределенностей Гейзенберга^{*)}. Заметим, что при этом ограничение накладывается не порознь на Δx или на Δp_x , а лишь на их произведение — $\Delta x \cdot \Delta p_x$.

Соотношение или принцип неопределенностей утверждает, что если частица локализована в пространстве со среднеквадратичным отклонением Δx , то ее импульс не имеет определенного значения, а характеризуется распределением $|B(p)|^2$ с «шириной» Δp . Физически это означает, что невозможно одновременно точно определить значения координаты и импульса частицы.

В качестве примера рассмотрим волновой пакет с распределением по импульсам в виде прямоугольника, показанного на рис. 3.3, а:

$$B(k) = \begin{cases} 0 & \text{при } (k_0 - a) > k > (k_0 + a), \\ A & \text{при } (k_0 - a) < k < (k_0 + a). \end{cases}$$

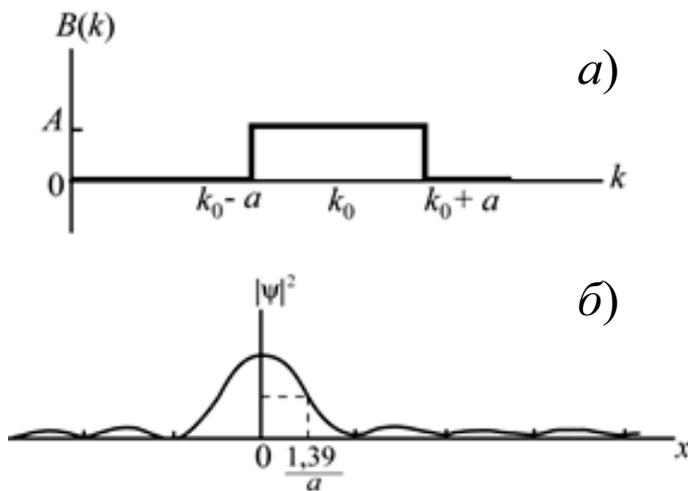


Рис. 3.3. Прямоугольное распределение по импульсам (а); б — распределение по координатам, или волновой пакет, соответствующий распределению на (а)

Найдем $\psi(x)$ и произведение $\Delta x \cdot \Delta p_x$ (Δx — полуширина распределения вероятностей координаты, измеренная на уровне половины максимального значения, и Δp_x — то же самое для импульса).

^{*)} Как будет показано ниже, соотношение $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$, полученное для гауссова распределения, может быть записано в форме: $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar$ или $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$. Последняя форма записи используется в квантовых статистиках, например, Ферми—Дирака или Бозе—Эйнштейна.

Используя формулу $\psi = \int A(k) \exp(ikx) dk$, находим

$$\psi(x) = A \int_{k_0-a}^{k_0+a} e^{ikx} dk = \frac{1}{ix} e^{ikx} \Big|_{k_0-a}^{k_0+a} = \frac{A}{ix} [e^{ix(k_0+a)} - e^{ix(k_0-a)}] = 2A \frac{\sin ax}{x} e^{ik_0x},$$

$$|\psi|^2 = 4A^2 \frac{\sin^2 ax}{x^2}.$$

Эта функция уменьшается вдвое при $ax = 1,39$. Следовательно,

$$a\Delta x = 1,39.$$

Поскольку $a = \Delta k = \Delta p_x / \hbar$, то $(\Delta p_x / \hbar) \cdot \Delta x = 1,39$.

Таким образом, $\Delta x \cdot \Delta p_x = 1,39\hbar$, т. е.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar.$$

Если известно, что частица покоится, то неопределенность импульса $\Delta p = 0$. Можно попытаться с помощью микроскопа определить положение частицы и тем самым обойти принцип неопределенности. Микроскоп позволит определить положение частицы с точностью до длины волны используемого света, $\Delta x \approx \lambda$. Поскольку $\Delta p = 0$, то произведение $\Delta x \cdot \Delta p_x$ также должно быть равно нулю, и принцип неопределенностей, казалось бы, нарушится. Но это не так. Мы пользуемся светом, а свет состоит из фотонов с импульсом $p = h/\lambda$. Чтобы обнаружить частицу, на ней должен рассеяться или поглотиться, по крайней мере, один из фотонов пучка света (рис. 3.4), и частице будет передан импульс, достигающий h/λ . Таким образом, в момент наблюдения положения частицы с точностью $\Delta x \approx \lambda$ неопределенность ее импульса равна $\Delta p_x \geq h/\lambda$. Перемножая Δp_x и Δx , находим

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \lambda \frac{h}{\lambda} = h,$$

что согласуется с соотношением неопределенностей. Этот пример иллюстрирует внутреннюю непротиворечивость квантовой механики.

Двойственная корпускулярно-волновая природа микрочастиц накладывает ограничения на точность определения физических величин, характеризующих состояние частицы. Причем эти ограничения никак не связаны с точностью измерений, достижимой в конкретном эксперименте, а имеют принципиальное значение.

Соотношения неопределенностей — фундаментальные соотношения квантовой механики, устанавливающие предел точности одновременного определения канонически сопряженных динамических переменных, характеризующих квантовую систему: координата —

импульс, действие — угол и т. д. Математически соотношения неопределенностей имеют вид неравенства, например

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar,$$

где Δx и Δp_x — неопределенности значений координаты x и сопряжённой ей компоненты p_x импульса (аналогичные соотношения справедливы и для пар других компонент координаты и импульса: $y, p_y; z, p_z$). Соотношения неопределенностей были установлены В. Гейзенбергом (*W. Heisenberg*) в 1927 г.



Рис. 3.4. Взаимодействие в микроскопе фотонов с частицей приводит к неопределённости её импульса в момент наблюдения $\Delta p \geq h/\lambda$

Среди толкований соотношений неопределенностей можно выделить, по крайней мере, три уровня, которым в англоязычной литературе соответствуют три различных термина: *uncertainty*, *indeterminateness*, *indeterminancy*. Наиболее часто, особенно в упрощённых изложениях принципов квантовой механики, соотношения неопределенностей (*uncertainty relations*) трактуют как ограничение на экспериментально достижимую точность измерения характеристик квантовых объектов, обусловленное неадекватностью классических приборов целям квантовых измерений.

Другое толкование (*indeterminateness*) исходит из предпосылки, что соотношение неопределенностей есть следствие свойства квантовых объектов, внутренне присущих им независимо от несовершенства конкретных реализаций экспериментальных установок, предназначенных для измерения этих свойств. Таким внутренним свойством является корпускулярно-волновой дуализм квантовых объектов, т. е. неразделимое сочетание волновых и корпускулярных свойств, равно необходимых для их полного описания. С этой точки зрения аналоги соотношений неопределенностей были хорошо известны, например, в

акустике и оптике задолго до создания квантовой механики. Так, для цуга излучения протяженностью Δx , представляющего собой волновой пакет с волновыми числами, лежащими в интервале Δk , справедливо соотношение

$$\Delta x \cdot \Delta k \sim 1,$$

которое с учётом квантового соотношения де Бройля $p = \hbar k$ эквивалентно $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$.

Второе толкование соотношений неопределенностей значительно шире и плодотворнее первого, поскольку оно представляет собой не частное утверждение о границах уточнения характеристик квантовых объектов, а гораздо более общий принцип неопределенностей. Этот принцип по существу является предпосылкой статистической интерпретации квантовой механики и важнейшим примером принципа дополнительности Бора (для этого расширенного толкования соотношений неопределенностей часто используют термин *indeterminancy*). Принцип дополнительности, сформулированный Нильсом Бором в 1927 г., сыграл важную роль в становлении квантовой механики.

Принцип дополнительности — принципиальное положение квантовой механики, согласно которому получение экспериментальной информации об одних физических величинах, описывающих микрообъект (элементарную частицу, атом, молекулу), неизбежно связано с потерей информации о некоторых других величинах, «дополнительных» к первым (канонически сопряженных с первыми). Такими взаимно дополнительными величинами являются, например, координата и импульс частицы.

С физической точки зрения, принцип дополнительности часто объясняют (следуя Бору) влиянием измерительного прибора, который всегда является макроскопическим объектом, на состояние микрообъекта. Такое толкование принципа дополнительности подтверждается анализом простейших экспериментов. При точном измерении одной из дополнительных величин (например, координаты частицы) с помощью соответствующего прибора другая величина (импульс) в результате взаимодействия частицы с прибором претерпевает полностью неконтролируемое изменение (например, рассмотренное выше измерение координаты частицы с помощью микроскопа, рис. 3.4).

Однако такое толкование принципа дополнительности наталкивается на возражения философского характера. С позиций современной квантовой теории измерений роль прибора заключается в «приготовлении» некоторого состояния квантовой системы.

Состояния, в которых взаимно дополнительные величины имели бы одновременно точно определенные значения, принципиально невозможны, причем если одна из таких величин точно определена, то значения другой полностью неопределенны. Таким образом, фактически принцип дополнительности отражает объективные свойства квантовых систем, не связанные с существованием наблюдателя, проводящего эксперимент.

С точки зрения этого более общего принципа, соотношения неопределенностей трактуются как способ сохранить классические понятия для описания квантовых систем путем взаимного ограничения области их совместной применимости.

Соотношение неопределенностей позволяет сделать вывод об устойчивости атома. Рассмотрим атом водорода и будем считать, что электрон движется вокруг ядра (протона) по круговой орбите радиуса r со скоростью v . Поскольку движение электрона по орбите происходит под действием кулоновской силы, то согласно второму закону Ньютона

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}.$$

Воспользуемся теперь соотношением неопределенностей. Будем считать, что неопределенность координаты электрона Δx равна радиусу орбиты r , а неопределенность импульса Δp не превышает самого значения импульса p , т. е. $\Delta p \approx p = mv$. В этом случае соотношение неопределенностей принимает вид

$$rmv \geq \hbar.$$

Исключая v , находим

$$r \geq \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} \approx 0,529 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,529 \text{ \AA}.$$

— радиус орбиты электрона в атоме водорода не может быть меньше найденной величины. Электрон не может упасть на ядро, т. е. атом является устойчивым образованием.

Соотношение неопределенностей позволяет также очертить границы применимости классической механики. Перепишем соотношение $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$ так, чтобы в него явно входила масса частицы m . Подставим $\Delta p_x = m\Delta v_x$:

$$\Delta v_x \geq \frac{\hbar}{m \cdot \Delta x}.$$

Поскольку $\hbar = 1,055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с — очень малая величина, то неопределенность скорости Δv_x может иметь заметное значение лишь для частицы с очень малой массой и для очень малых размеров области ее локализации Δx .

Возьмем в качестве примера малую, но макроскопическую частицу – пылинку, масса которой $m = 10^{-6}$ кг. Разумной погрешностью определения координат этой пылинки будем считать $\Delta x = 10^{-6}$ м. В этом случае неопределенность скорости пылинки составляет $\Delta v_x \sim 10^{-22}$ м/с, что на много порядков меньше погрешности измерения лучших экспериментальных установок. Таким образом, для рассматриваемой пылинки, как и вообще для макроскопических тел, соотношение неопределенностей не играет практически никакой роли. Для описания движения таких тел, исходя из принципа соответствия, гораздо проще пользоваться не квантовой, а классической механикой.

Принцип соответствия гласит, что предсказания квантовой механики и классической физики совпадают в пределе для областей больших размеров и энергий. Квантово-механические решения задач приближаются к классическим, когда входящие в задачу длины во много раз превышают длину волны де Бройля рассматриваемой частицы. Этот принцип только выражает результат, который можно было бы доказать в каждом отдельном случае. Он не является добавочным допущением квантовой механики. Принцип соответствия означает, что квантовую механику вполне можно экстраполировать на область лабораторных масштабов. Напротив, экстраполяция классической механики на область атомных размеров, безусловно, недопустима.

Рассмотрим пример, когда классические результаты получались как предельный случай квантово-механических расчетов. Исследуем переход к классическому пределу гармонического осциллятора. На рис. 3.5 представлены кривые для $|\psi(x)|^2$, которые дают относительную вероятность нахождения частицы в различных положениях, вычисленные по правилам квантовой механики. При малых значениях квантовых чисел, определяющих допустимые дискретные значения энергии E_n ($n = 0, 1, 2$) не обнаруживается соответствия между квантовой (сплошные кривые) и классической (пунктирные кривые) теорией. Существенный интерес представляют волновые функции для больших n ($n \geq 10$).

Пунктирные линии изображают ту же вероятность, вычисленную классически. Поскольку скорость частицы больше вблизи $x = 0$, то вероятность нахождения ее в интервале Δx вблизи $x = 0$ меньше, чем в интервале Δx вблизи точек поворота, а затем резко спадает к нулю вне этих точек, как и ожидается в классической физике. Однако быстрые колебания $|\psi|^2$ как функции x сохраняются даже при больших n , соответствующих описанию осциллятора обычных лабораторных размеров (например, маятника). Поэтому может показаться, что имеется расхожде-

ние между квантово-механическим и классическим описаниями движения даже в пределе $n \rightarrow \infty$. Но если представить себе опыт, целью которого является наблюдение этой тонкой структуры, мы должны будем использовать достаточно короткие волны в микроскопе, чтобы суметь разрешить эти максимумы. Для обеспечения такого разрешения излучение должно обладать значительной энергией (короткие волны), так что в результате его действия может легко измениться квантовое состояние n . Изменение n даже на единицу приводит к полному изменению тонкой структуры $|\psi(x)|^2$, изменяя, например, $|\psi(0)|^2$ от максимума до нуля (см. кривые при $n = 1$ и $n = 2$, рис. 3.5).

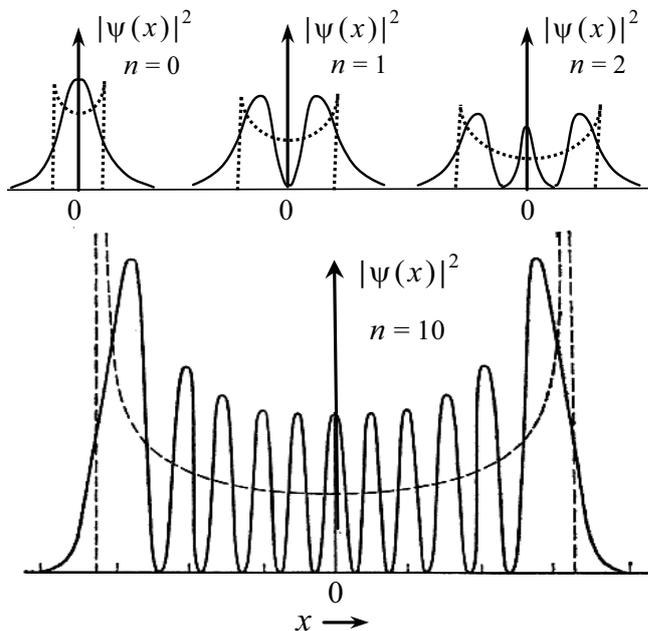


Рис. 3.5. Плотность вероятности положения $|\psi(x)|^2$ для различных состояний n гармонического осциллятора (сплошные кривые) и для классического осциллятора с такой же энергией (пунктирные кривые)

Повторяя опыт с целью получения хорошего статистического среднего мы измеряем не $|\psi(x)|^2$ при фиксированном n , а $|\psi(x)|^2$ для смеси состояний с различными значениями n . Смесь состояний с разными n , например от 100 до 110, дает зависимость $|\psi(x)|^2$, весьма похожую на пунктирную кривую на рис. 3.5. Таким образом, предсказание квантовой теории для реальных экспериментов в пределе $n \rightarrow \infty$ такое же, какое дает классическая механика.

Посмотрим, что дает соотношение неопределенностей для микрочастицы, например для электрона в атоме. Масса электрона $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг, неопределенность его координаты возьмем равной размеру атома $\Delta x \sim 10^{-10}$ м. В этом случае $\Delta v_x \sim 10^6$ м/с.

Полученное значение сравнимо со скоростью электрона в атоме. Энергия электрона в атоме по порядку величины составляет 10 эВ. Это соответствует скорости электрона $v \sim 10^6$ м/с — неопределенность ско-

рости электрона Δv_x сравнима со скоростью электрона v . Поведение электрона в атоме описывается законами квантовой механики.

Получим из соотношений неопределенностей Гейзенберга границы применимости классической механики для описания движения частицы в области пространства с характерным линейным размером L .

Классическое понятие траектории для описания движения частицы можно использовать, если неопределенность координаты мала по сравнению с характерным размером области движения $\Delta x \ll L$.

Для неопределенности координаты частицы ($\Delta p_x \approx p_x$) получим

$$\Delta x \geq \frac{\hbar}{\Delta p_x} \approx \frac{\hbar}{p} = \frac{\lambda_B}{2\pi},$$

где $\lambda_B = h/p = 2\pi\hbar/p$ — длина волны де Бройля.

Условие применимости законов классической механики и возможности пренебречь квантовыми эффектами запишем в виде

$$\lambda_B \ll L.$$

Полученное соотношение нарушается для микрочастиц, движущихся в областях пространства порядка атомных размеров.

Соотношение неопределенностей для энергии E и времени t по форме совпадает с $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$ и имеет вид:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar,$$

однако его толкование отличается от интерпретации соотношения $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$. Обычно соотношение неопределенностей $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ трактуется как невозможность точного определения энергии квантовой системы ($\Delta E = 0$) за ограниченный интервал времени Δt . Для иллюстрации соотношения неопределенностей пары E и t Н. Бор обращал внимание на невозможность определить понятие монохроматической волны в данный момент времени.

Другая трактовка соотношения неопределенностей $\Delta E \Delta t \geq \hbar$ тесно связана с понятием квазистационарного состояния. В этом случае ΔE — неопределенность энергии E квантовой системы, а Δt — интервал времени, характеризующий эволюцию E в интервале значений ΔE . Для возбужденных квантовых систем (например, атома или молекулы) неопределенность энергии состояния ΔE (естественная ширина уровня) связана с его временем жизни Δt соотношением $\Delta E \Delta t \geq \hbar$.

Благодаря существованию соотношения неопределенностей $\Delta E \Delta t \geq \hbar$, возможны виртуальные переходы, происходящие с нарушением 2-го постулата Бора, т. е. с энергиями $E \neq E_{ij} = (E_i - E_j)$, где E_i и

E_j — энергии начального (i) и конечного (j) состояний квантовой системы. При этом время перехода Δt определяется из соотношения $\Delta E \Delta t \geq \hbar$, в котором $\Delta E = |E - E_{ij}|$. Виртуальные переходы могут происходить как с недостатком ($\Delta E < 0$), так и с избытком ($\Delta E > 0$) энергии E по сравнению с энергией идеального перехода E_{ij} , причем это имеет место как при испускании, так и при поглощении энергии квантовой системой. Эта энергия может поглощаться и испускаться в виде фотонов. В этом случае виртуальное поглощение или испускание фотонов лежит в основе многофотонных процессов (например, многофотонной ионизации).

Соотношения неопределенностей являются не только важной составной частью понятийного базиса квантовой механики, но они дают и способ для простых оценок количественных характеристик квантовых систем.

Например, исходя из известных размеров атома водорода $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/(me^2)$ и соотношения $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$, можно оценить характерную скорость атомного электрона в основном состоянии: $v \geq \Delta p_x/m \approx \hbar/(ma_0) = e^2/(4\pi\epsilon_0\hbar)$. Тогда $v/c \approx e^2/(4\pi\epsilon_0 c\hbar) \approx \alpha$. Здесь m и e — масса и заряд электрона; c — скорость света в вакууме; $\alpha = 1/137$ — постоянная тонкой структуры, характеризующая «силу» электромагнитного взаимодействия.

Для ограниченных в объеме квантовых систем из соотношений неопределенностей следует существование энергии нулевых колебаний систем.

Нулевая энергия — разность между энергией E_0 основного состояния квантово-механической системы (например, молекулы, в которой атомы совершают гармонические колебания около положения равновесия) и энергией U_{\min} , соответствующей минимуму потенциальной энергии системы. Существование нулевой энергии (нулевых колебаний) является следствием соотношения неопределенностей $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$.

В классической механике частица может находиться в точке, отвечающей минимуму потенциальной энергии U_{\min} , обладая одновременно равной нулю кинетической энергией ($K = 0$). В этом случае частица находится в состоянии устойчивого равновесия и имеет минимальную энергию U_{\min} , равную потенциальной энергии в точке равновесия.

Вследствие квантово-механического соотношения неопределенностей для координаты и импульса: $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar$, локализация частицы ($\Delta x \rightarrow 0$) вблизи минимума потенциала приводит к большому значению средней кинетической энергии $\langle K \rangle$ частицы из-за разброса в значениях

импульса ($\Delta p_x \geq \hbar/\Delta x$). С другой стороны, уменьшение степени локализации частицы ($\Delta x \neq 0$) сопровождается ростом средней потенциальной энергии $\langle U \rangle$, поскольку частица значительное время находится в области пространства, где потенциальная энергия превышает U_{\min} .

Энергия основного состояния E_0 соответствует наименее возможной энергии квантово-механической системы, совместимой с соотношением неопределенностей. Например, для одномерного осциллятора $E_0 = \hbar\omega/2$, где ω — частота колебаний осциллятора.

Наличие нулевой энергии — общее свойство квантово-механических систем, обладающих нулевыми колебаниями. Поэтому связанная система (например, молекула) не может перейти в состояние с энергией, меньшей энергии нулевых колебаний без изменения своей структуры.

В период становления квантовой механики широко обсуждался вопрос, противоречит ли детерминизму^{*)} (принципу причинности) вероятностное описание микроявлений. К разрешению этого вопроса привело понимание необходимости отказаться от детерминизма классической механики при рассмотрении статистических закономерностей микромира. Переход к адекватному описанию закономерностей микромира на языке волновых функций приводит к тому, что и в квантовой механике начальное состояние системы полностью определяет всю последующую ее эволюцию.

Многие ученые, воспитанные на классическом детерминизме (принципе причинности) в физике, в 20–40 гг. XX века не воспринимали основные понятия квантовой механики. Альберт Эйнштейн долго скептически относился к квантовой механике. В течение ряда лет он выступал с изложением разного рода «парадоксов», которые, по его мнению, доказывали несостоятельность квантовой механики. Именно анализ этих парадоксов, как писал Нильс Бор, и помог существенному выяснению основ теории.

Вот как, например, Эйнштейн пытался опровергнуть утверждение квантовой механики, что нельзя одновременно точно фиксировать время и энергию (соотношение неопределенностей $\Delta E \Delta t \geq \hbar$). Он предлагал воспользоваться законом эквивалентности энергии и массы ($E = mc^2$) и провести такой мысленный эксперимент. Рассмотрим зак-

^{*)} Согласно классическому детерминизму, существует строго однозначная связь между физическими величинами (координаты и импульсы в классической механике), характеризующими состояние системы в начальный момент времени, и значениями этих величин в любой последующий (или предыдущий) момент времени.

рытый ящик, в котором находится свет (фотоны) и точные часы, в заданный момент открывающие отверстие в ящике на такой короткий промежуток времени, за который из него может вылететь только один фотон. Таким образом, момент вылета фотона из ящика точно известен. Если ящик подвешен в поле тяжести на пружине, по его смещению можно определить изменение его полной массы, вызванное вылетом фотона, откуда точно определяется энергия этого фотона.

Ошибочность подобного рассуждения, как показал Нильс Бор, в том, что в нем не учтено изменение хода времени (или хода часов) при смещении системы отсчета (т. е. ящика с часами) в поле тяжести. Эта зависимость хода времени от поля тяготения проявляется в известном смещении к красному концу спектра излучения тел большой массы (Солнца и звезд). В данном случае зависимость хода часов от их положения в поле тяжести вносит неопределенность в их показания, вполне соответствующую принципам квантовой механики, так что «парадокс» Эйнштейна полностью разрешается.

Эти споры теперь уже далеко в прошлом. Однако совершенно ясно, что механистический детерминизм классической физики несовместим с многогранностью и вместе с тем с целостностью реальных объектов. Электроны и свет одновременно и частицы, и волны обладают свойствами, несовместимыми с точки зрения классической физики. В настоящий момент нерелятивистская квантовая механика представляет последовательную, логически стройную теорию, законченностью не уступающую, а может быть и превосходящую, механике Ньютона.

3.3. Скорость волновых пакетов

Найдем скорость распространения волны де Бройля для фотона. Из оптики известно, что фазовая скорость волны $v_\phi = \omega/k$. У фотонов энергия $E = pc$, поскольку масса фотона равна нулю. Воспользовавшись этим равенством, а также формулами $E = \hbar\omega$ и $p = \hbar k$, находим

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{pc}{\hbar} = kc, \quad v_\phi = \frac{\omega}{k} = c.$$

Таким образом, фазовая скорость волны де Бройля для фотона совпадает со скоростью распространения электромагнитных волн.

Вычислим фазовую скорость волны де Бройля для нерелятивистской частицы, кинетическая энергия которой равна $E = p^2/2m$. Учитывая равенства $E = \hbar\omega$ и $p = \hbar k$, находим

$$v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{p/\hbar} = \frac{p^2/2m}{p} = \frac{p}{2m} = \frac{mv}{2m} = \frac{v}{2},$$

т. е. фазовая скорость волны де Бройля равна половине скорости частицы. Этот результат, на первый взгляд, кажется неожиданным, но ни к каким противоречиям не приводит.

Как известно из оптики, скорость передачи сигнала определяется не фазовой, а групповой скоростью волны (скоростью распространения волнового пакета) и вычисляется по формуле: $v_g = d\omega/dk$. С помощью $E = \hbar\omega$ и $p = \hbar k$ для волнового пакета имеем

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}.$$

Вычислим групповую скорость фотонов и нерелятивистских частиц. Для фотонов

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{d(pc)}{dp} = c,$$

чего и следовало ожидать. Для нерелятивистских частиц найдем

$$v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{d(p^2/2m)}{dp} = \frac{p}{m} = \frac{mv}{m} = v.$$

Таким образом, групповая скорость волн де Бройля действительно равна скорости частицы.

3.4. Расплывание волнового пакета

Волновой пакет можно представить в виде интеграла Фурье —

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{ikx - i\omega(k)t} dk,$$

где коэффициенты $A(k)$ определяют вклад различных волн де Бройля в рассматриваемую волновую функцию $\psi(x, t)$; коэффициенты заметно отличны от нуля лишь для значений k , лежащих внутри интервала Δk вблизи некоторого $k = k_0$.

Разброс Δx по координатам функции $\psi(x, t)$ (ширина пакета) скоррелирован с разбросом Δk функции $A(k)$ по волновым числам k :

$$\Delta x \cdot \Delta k \geq 1/2.$$

Эволюция волнового пакета во времени предопределена, если для волновой функции $\psi(x,t)$ известны $A(k)$ и закон дисперсии волн — связь ω и k : $\omega = \omega(k)$.

В вакууме связь между ω и k линейна: $\omega = ck$, где c — скорость световых волн. Подставляя $\omega = ck$ в интеграл Фурье, получим

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} A(k)e^{ik(x-ct)} dk \equiv \psi(x-ct, 0),$$

т. е. в этом случае волновой пакет (волновая функция) распространяется с групповой скоростью $v_g = d\omega/dk = c$ без изменения формы.

В случае произвольной связи $\omega = \omega(k)$ зависимость $\psi(x,t)$ имеет более сложный вид. Рассмотрим две частицы, одна из которых имеет групповую скорость v_g , а другая — скорость $(v_g + \Delta v_g)$. В момент времени $t = 0$ их координаты совпадают, а спустя промежуток времени t частицы расходятся на расстояние

$$\Delta x = (\Delta v_g)t.$$

Покажем, что отдельному волновому пакету свойственен разброс значений групповой скорости Δv_g , который приводит к увеличению его ширины Δx . Оценим величину Δv_g :

$$\Delta v_g = \frac{dv_g}{dp} \Delta p.$$

Для частицы $v_g = v$, значит

$$\Delta v_g = \frac{dv}{dp} \Delta p \approx \frac{1}{m} \Delta p.$$

Начальное значение Δp ограничено согласно принципу неопределенностей величиной $\hbar/\Delta x_0$, где Δx_0 — неопределенность начального положения или ширина исходного волнового пакета. Подставим $\Delta p = \hbar/\Delta x_0$ в выражение для Δv_g :

$$\Delta v_g \approx \frac{1}{m} \left(\frac{\hbar}{\Delta x_0} \right).$$

Поскольку $\Delta x = \Delta v_g t$, имеем

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{m\Delta x_0} t.$$

Уширение пакета растет пропорционально t и складывается с начальной шириной Δx_0 . Подобного «расплывания» волнового пакета можно избежать, только поместив частицу в потенциальную яму. На

рис. 3.6 показана деформация волнового пакета со временем, а на рис 3.7 — столкновение описывающего свободную частицу волнового пакета с потенциальным барьером.

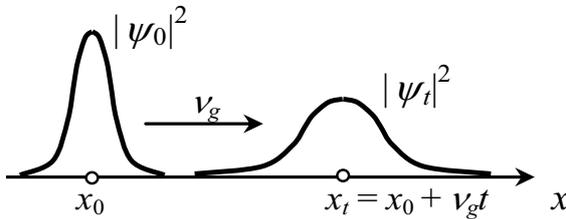


Рис. 3.6. Расплывание волнового пакета. Гауссов волновой пакет в два последовательных момента времени. Пакет движется вправо с групповой скоростью, которая совпадает со скоростью частицы

Оценим количественно скорость расплывания волнового пакета в случае свободной частицы. Рассмотрим свободный электрон, локализованный в начальный момент времени в области $\Delta x_0 = 10^{-10}$ м (типичный размер атома). Спустя одну секунду

$$\Delta x \approx \frac{\hbar}{m\Delta x_0} t = \frac{10^{-34}}{9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 10^{-10}} \cdot 1 = 1,1 \cdot 10^6 \text{ м} = 1100 \text{ км.}$$

Электронное облако окажется по своим размерам сравнимым с радиусом Луны. Квантовая теория позволяет точно определить поведение волновой функции в будущем, если она известна в начальный момент времени. Однако это мало чем может помочь, поскольку волновая функция очень быстро расплывается по всему пространству.

Согласно квантовой теории нет способа установить, каким из электронов был поглощен фотон при фотоэффекте. Мы можем лишь вычислить вероятность поглощения фотона данным электроном. Это же относится и к месту попадания отдельного электрона на экран (см. рис. 2.24). Интерференционная картина характеризует лишь вероятность обнаружить электрон в данной точке экрана. То же самое справедливо и для распада радиоактивного ядра, например, урана. Не существует способа определить момент времени, когда произойдет распад данного ядра урана. Согласно квантовой теории все, что нам, вообще, может быть известно — это только вероятность, с которой в данный интервал времени может произойти распад. Предсказываемые вероятности можно затем сопоставить со средними значениями по многим наблюдениям.

Когда речь идет о взаимодействиях и структуре микрочастиц, представления квантовой теории коренным образом отличаются от классических. Если же квантовая теория верна, то нельзя надеяться, что с помощью классической физики можно изучить явления микромира и строение вещества.

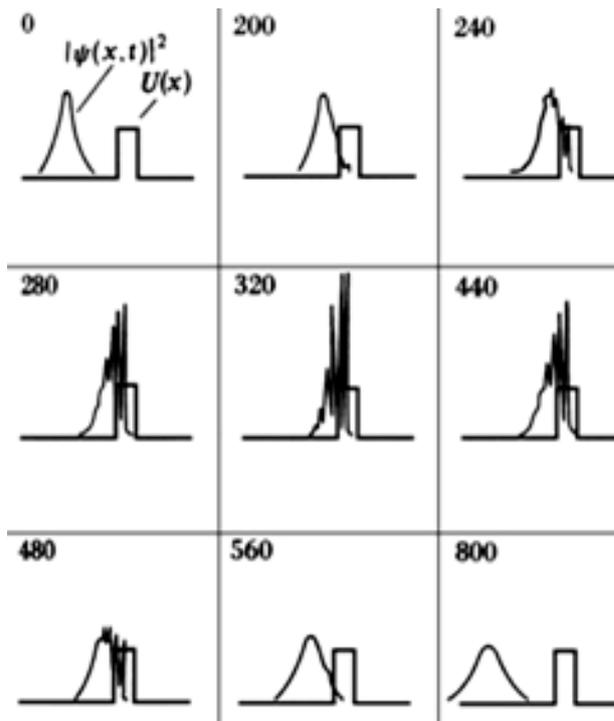


Рис. 3.7. Столкновение гауссова волнового пакета с потенциальным барьером прямоугольной формы. Для удобства плотность вероятности и потенциальный барьер построены на одной и той же оси (высота пакета относительно величины барьера не имеет определённого значения). Средняя энергия волнового пакета равна половине высоты барьера. Ширина пакета растёт со временем (время указано числами в левой верхней части каждого рисунка)

3.5. Частица в ящике

Рассмотрим частицу в одномерном ящике с абсолютно отражающими стенками, расстояние между которыми равно L (рис. 3.8). Если полная энергия частицы E меньше её потенциальной энергии U ($E < U$), то говорят, что частица находится в «потенциальной яме». На рисунке приведен случай, когда потенциальная энергия частицы $U(x)$ на отрезке $0 \leq x \leq L$ равна нулю и обращается в бесконечность при $0 \geq x \geq L$, т. е. вне ящика.

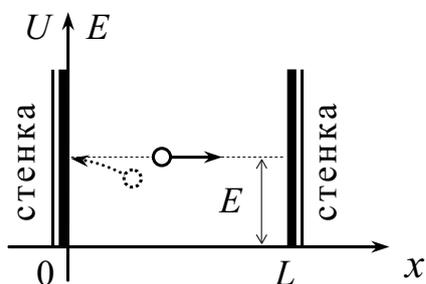


Рис. 3.8. Частица отражается от левой стенки ящика, имеющего длину L ; E — полная энергия частицы в ящике

Рассмотрим вначале, как будут вести себя в таком ящике классические частицы. На отрезке $0 \leq x \leq L$ они движутся с постоянной кинетической энергией ($K = E - U$) и, следовательно, с постоянной скоростью. Энергия частиц E в ящике может иметь любое значение. При

$0 \leq E < U$ частицы не могут выйти за стенки ящика, потому что вне ящика потенциальная энергия больше полной, и кинетическая энергия должна была бы иметь отрицательное значение, что невозможно. Таким образом, частицы, подчиняющиеся классической физике, отсутствуют вне потенциальной ямы и могут быть с равной вероятностью найдены в любом месте ящика.

Частицы, подчиняющиеся квантовой механике, ведут себя существенно иначе. Основные черты могут быть поняты и без расчетов. Мы знаем, что волновая функция частицы должна быть непрерывной и гладкой. Этому требованию удовлетворяют плоские волны.

Справа от стенки в точке $x = 0$ происходит наложение двух волн, распространяющихся в противоположных направлениях. В этом случае

$$\psi(x, t) = Be^{ikx - i\omega t} - Be^{-ikx - i\omega t} = B(e^{ikx} - e^{-ikx})e^{-i\omega t}.$$

Мы выбрали знак «минус» в силу того, что Ψ должна обращаться в нуль при $x = 0$ (ψ обращается в нуль за стенкой и должна быть непрерывной). Используя формулу

$$\sin kx = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{2i},$$

перепишем $\psi(x, t)$ в виде

$$\psi(x, t) = 2iBe^{-i\omega t} \sin kx.$$

Пусть в момент времени $t = 0$ $A = 2iB$, а $\psi(x) = A \sin kx$ – волновая функция, зависящая только от координат.

Функция $\psi(x)$ должна обращаться в нуль и при $x = L$.

$$\psi(L) = A \sin kL = 0.$$

Таким образом, $kL = n\pi$, где n – целое число и разрешены только дискретные значения волнового числа k_n :

$$k_n = n\pi/L.$$

Это означает, что в ящике укладывается целое число полуволн и совпадает с условием возникновения стоячей волны на струне:

$$L = n(\lambda_n/2).$$

На рис. 3.9 изображены волновые функции:

$$\psi_n(x) = A \sin \frac{n\pi}{L}x$$

для $n = 1, 2, 3, 4$. Соответствующие значения импульса записываются в виде

$$p_n = \hbar k_n$$

или

$$p_n = n(\pi\hbar/L).$$

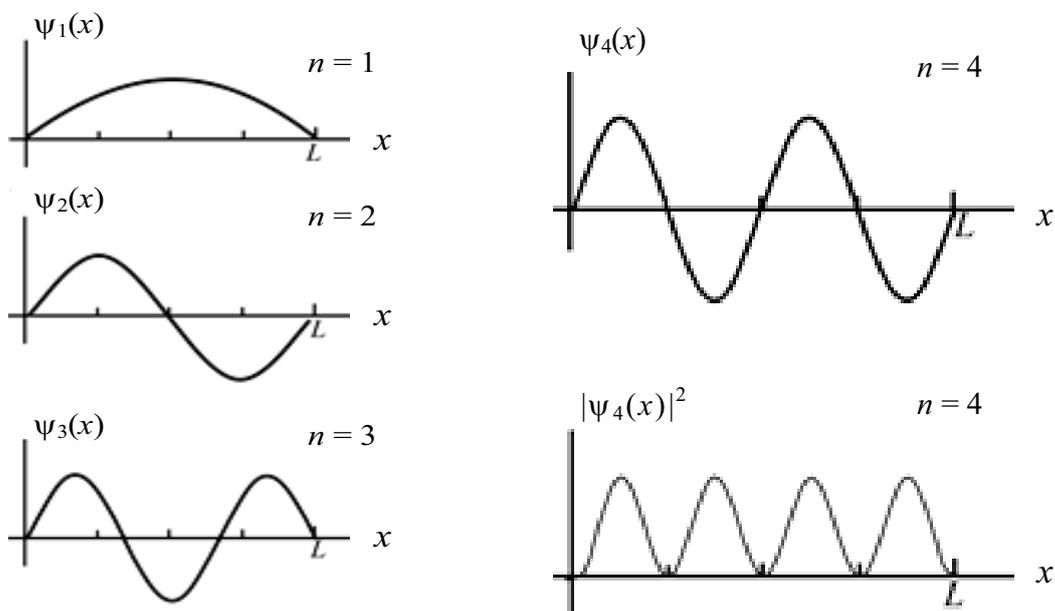


Рис. 3.9. Первые четыре стоячие волны, соответствующие частице в ящике; на последнем рисунке — плотность вероятности для частицы в состоянии с $n = 4$

Этим импульсам соответствуют значения кинетической энергии:

$$K_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Поскольку в рассмотренном случае (рис. 3.8) за уровень отсчета потенциальной энергии принято дно ящика, то полная энергия частицы E_n в ящике равна её кинетической энергии K_n .

Минимальная возможная энергия $E_1 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ отвечает $n = 1$, а волновая функция $\psi_1(x)$ представляет собой половину синусоиды. Эта энергия основного состояния. В квантовой механике частица в ящике не может иметь энергию меньше $\pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ вследствие того, что ψ в ящике должна быть ненулевой функцией. В классической же физике локализованная частица может иметь и нулевую энергию.

Чтобы получить представление о масштабе этих энергий, рассмотрим электрон, заключенный в ящик с размерами, типичными для атома (10^{-10} м или 1 Å). В этом случае

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \cdot n^2 = \frac{3,14^2 \cdot (1,05 \cdot 10^{-34})^2}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} \cdot (10^{-10})^2} \cdot n^2 = 5,97 \cdot 10^{-18} \cdot n^2 \text{ Дж,}$$

$$E_n = 37,3 \cdot n^2 \text{ эВ.}$$

На рис. 3.10 представлены четыре низших уровня энергии. Энергия E_1 сравнима по величине с кинетической энергией электрона в атоме водорода.

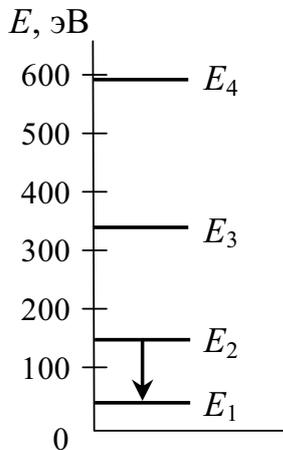


Рис. 3.10. Четыре низших энергетических уровня электрона, находящегося в ящике, шириной 10^{-10} м = 1 Å

Допустим, что в ящике с линейным размером $L = 10^{-10}$ м (рис. 3.10) в состоянии с $n = 2$ находится электрон, который может испустить фотон и перейти в состояние с наименьшей энергией. Найдем длину волны фотона. Из закона сохранения энергии следует, что энергия фотона

$$h\nu = E_2 - E_1 = 4E_1 - E_1 = 3 \cdot 37,3 = 111,9 \text{ эВ} = 1,79 \cdot 10^{-17} \text{ Дж},$$

откуда

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{1,79 \cdot 10^{-17}}{6,63 \cdot 10^{-34}} = 2,70 \cdot 10^{16} \text{ с}^{-1}$$

и

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{3 \cdot 10^8}{2,7 \cdot 10^{16}} = 1,11 \cdot 10^{-8} \text{ м} = 111 \text{ Å}.$$

В этом примере фотон принадлежит ультрафиолетовой области спектра электромагнитного излучения, в которой как раз и расположены наиболее интенсивные линии спектра водорода. Энергия электрона в ящике может принимать лишь определенные дискретные значения.

Энергии и длины волн фотонов, испускаемых квантовой системой, также будут составлять дискретный набор значений, как и спектр излучения атомов. Электрон, заключенный в ящике, является очень грубой моделью атома водорода. Ящиком служит прямоугольная потенциальная яма. В атоме водорода электрон движется в потенциальной яме, образуемой кулоновским полем (рис. 3.11, б). Однако в обоих случаях качественное поведение оказывается сходным. Электрон должен описы-

ваться стоячей волной. Существует вполне определенный набор возможных волновых функций ψ_n и соответствующих им энергий E_n .

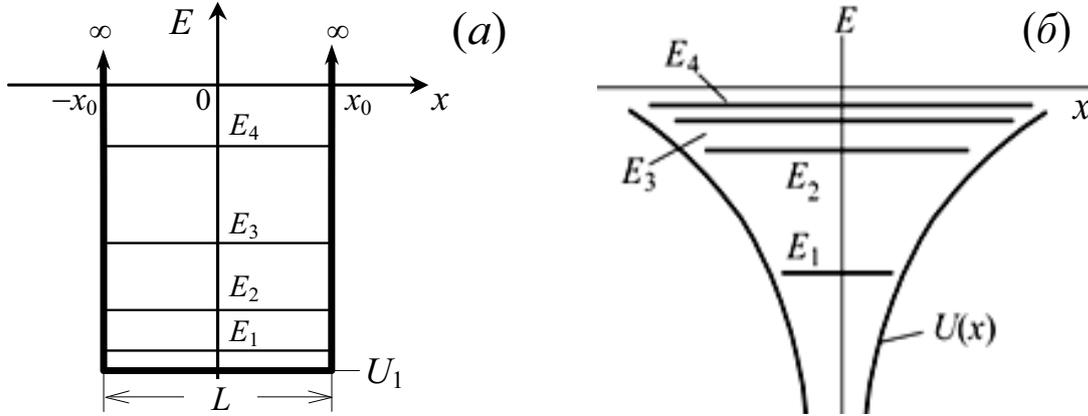


Рис. 3.11. Четыре низших энергетических уровня в случае потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками и шириной $L = 2x_0$ (а) и в случае потенциальной ямы, образованной силой электростатического притяжения (б)

Если ящик настолько мал, что энергия частицы в нем сравнима с mc^2 , точное значение энергий E_n частицы можно найти, если воспользоваться релятивистским соотношением:

$$E_n = c\sqrt{p_n^2 + m^2c^2}.$$

Здесь E_n — полная энергия частицы, включая энергию покоя mc^2 . Для релятивистских частиц также справедливо соотношение де Бройля. Последнее выражение с учетом условия $p_n = n(\pi\hbar/L)$ можно переписать в виде

$$E_n = c\sqrt{n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{L^2} + m^2c^2}.$$

Пусть частица с энергией E находится в потенциальной яме, показанной на рис. 3.11, а, где начало отсчета потенциальной энергии сдвинуто на величину U_1 относительно уровня вакуума. Таким образом, внутри ямы потенциальная энергия частицы равна U_1 . Величина U_1 отрицательна.

Волновая функция частицы в яме имеет вид

$$\psi = A\sin(kx + \psi),$$

где волновой вектор k можно получить из соотношений $E = p^2/(2m) + U_1$ и $p = \hbar k$:

$$p = \sqrt{2m(E - U_1)}; \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_1)}.$$

Вычислим вторую производную $d^2\psi/dx^2$ волновой функции частицы, находящейся в яме, и допустимые значения кинетической энергии частицы. Вторая производная $\psi(x)$ имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_1)\psi$$

— это есть не что иное, как уравнение Шрёдингера для частицы, находящейся в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

Набор значений кинетической энергии K_n дается выражением

$$K_n = \frac{p_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Нужно учесть, что $L = 2x_0$ и $K_n = (E_n - U_1)$. Таким образом,

$$E_n - U_1 = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(2x_0)^2};$$

$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mx_0^2} + U_1.$$

Отметим, что потенциальная энергия U для каждой задачи произвольна в том смысле, что выбор начала отсчета для U произволен. Так, в рассмотренной выше задаче можно (для одной и той же кинетической энергии частицы) положить $U = U_1$ или $U = 0$. В обоих случаях должен получиться один и тот же ответ для любой величины, которую можно сравнить с результатом наблюдения. Аналогично в теории электрических цепей можно положить потенциал $\varphi = 0$ в произвольной точке; вычисленные значения токов и разностей потенциалов не зависят от выбора начала отсчета потенциала или потенциальной энергии. Посмотрим, как это требование выполняется в рассматриваемом случае. Если положить $U = U_1$ (рис. 3.11), а не $U = 0$ (рис. 3.8), то полная энергия $E = (K + U)$ будет иной при тех же физических условиях (та же кинетическая энергия).

Однако разность энергий ΔE_{mn} между энергетическими уровнями E_m и E_n для произвольного значения U_0 не зависит от выбора начала отсчета потенциальной энергии:

$$\Delta E_{mn} = E_m - E_n = (K_m + U_0) - (K_n + U_0) = K_m - K_n.$$

А только эта разность ΔE_{mn} и наблюдается экспериментально.

3.6. Уравнение Шрёдингера

Свободные частицы обладают определенным импульсом и определенной длиной волны. В общем случае на частицу могут действовать внешние силы, характеризуемые потенциальной энергией взаимодействия $U(x)$. Поскольку полная энергия

$$E = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

сохраняется постоянной, возрастание потенциальной энергии U с x будет сопровождаться уменьшением импульса p и соответствующим увеличением длины волны. Таким образом, волновой функции должна соответствовать меняющаяся длина волны. На рис. 3.12, б изображена волновая функция, у которой длина волны увеличивается с ростом x . Точный вид волновой функции $\psi(x)$ с меняющейся длиной волны можно найти, решая дифференциальное уравнение, сформулированное австрийским физиком-теоретиком Эрвином Шрёдингером в 1926 г.

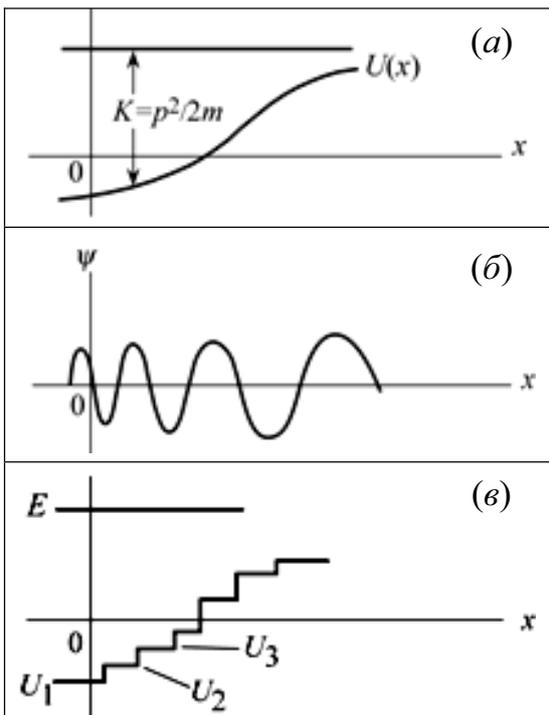


Рис. 3.12. С ростом x потенциальная энергия $U(x)$ возрастает, а K уменьшается (а); б – соответствующая волновая функция $\psi(x)$, длина волны которой увеличивается с x ; в – аппроксимация функции $U(x)$, приведённой на рис. а, ступенчатой функцией

Общее временное уравнение Шрёдингера, позволяющее определить в любой момент времени волновую функцию ψ для частицы массы m , движущейся в силовом поле $\mathbf{F} = -\text{grad}U$, описываемом скалярной потенциальной функцией $U(x,y,z,t)$, имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi.$$

Здесь $i = \sqrt{-1}$ — мнимая единица, а \hbar — рационализированная постоянная Планка. Стандартным символом Δ обозначен дифференциальный оператор Лапласа, который в декартовой системе координат имеет вид

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

В общем случае в задачах квантовой механики дифференциальное уравнение в частных производных должно решаться с учетом определенных начальных и граничных условий, налагаемых на волновую функцию. Начальное условие определяет значение волновой функции в момент времени $t = 0$.

На волновую функцию ψ накладываются следующие три условия, которые столь же важны, как и само уравнение Шрёдингера:

а) интеграл от $|\psi|^2$ должен быть конечным; и если волновая функция нормирована, то

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\psi|^2 dV = 1 \quad \text{или} \quad \int_{V \rightarrow \infty} \psi^* \psi dV = 1,$$

где звездочка означает комплексное сопряжение, $dV = dx dy dz$;

б) функция ψ должна быть непрерывной и однозначной;

в) производная $\partial\psi/\partial x$ должна быть непрерывной.

Все эти три условия являются необходимыми. Например, условие (а) означает, что частица, например электрон, с достоверностью находится где-то в пространстве. Условие (б) следует из того, что разрыв непрерывности ψ обусловил бы разрыв непрерывности $|\psi|^2 dV$, т. е. вероятности нахождения частицы в объеме dV , в то время как эта вероятность должна изменяться непрерывно от точки к точке, если электроны не рождаются или не уничтожаются. Поскольку производная $\partial\psi/\partial x$ пропорциональна импульсу, становится ясным условие (в), т. е. требование непрерывности $\partial\psi/\partial x$. Нарушение непрерывности импульса означало бы нарушение закона сохранения импульса (за исключением того идеализированного случая, когда потенциальная энергия бесконечно велика, см. рис. 3.16). Однозначность ψ (условие б) необходима для того, чтобы не могло быть неоднозначности в предсказаниях теории. Все три условия позволяют отобрать одно истинное решение из ряда возможных решений уравнения Шрёдингера.

Уравнение Шрёдингера, как и другие основные физические уравнения, не может быть выведено из других соотношений. Его следует рассматривать как некоторое научное положение, справедливость которого доказывается согласием результатов расчетов с данными экспериментов.

Такое согласие установлено для большого числа явлений в атомной и ядерной физике. Квантовые эффекты, предсказанные с помощью уравнения Шрёдингера, лежат в основе многих технических устройств, приборов и технологий.

Уравнение Шрёдингера тесно связано с гипотезой де Бройля и вытекающим из нее корпускулярно-волновым дуализмом материи. Действительно, непосредственной проверкой легко убедиться, что для свободной частицы с кинетической энергией $E = p^2/2m$, движущейся в отсутствие силовых полей ($U = 0$, $\mathbf{F} = 0$) в направлении оси x , решением уравнения Шрёдингера –

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

– является волновая функция

$$\Psi(x, t) = A \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right\},$$

соответствующая плоской волне де Бройля. Этот факт позволяет утверждать, что и в общем случае уравнение Шрёдингера является волновым уравнением. Линейность этого уравнения обуславливает принцип суперпозиции квантовых состояний, физическое содержание которого будет обсуждаться в п. 3.9.

Связь между квантовой и классической механикой аналогична связи между волновой и геометрической оптикой. В обоих случаях переход от одной теории к другой соответствует переходу от относительно больших длин волн (частицы или излучения) к малым длинам волн, если их сравнивать с характерным размером L области неоднородности силового поля или оптических свойств среды. Этот вывод иллюстрирует следующая таблица:

Волновая оптика	Квантовая механика
$\lambda \geq L$	$\lambda_{\text{Б}} \geq L$
Геометрическая оптика	Классическая механика
$\lambda \ll L$	$\lambda_{\text{Б}} \ll L$

В таком сравнении теорий траектория движения классической частицы является аналогом светового луча в геометрической оптике.

Формально малость длины волны де Бройля для частицы можно обеспечить, считая квант действия \hbar некоторым параметром задачи и осуществляя предельный переход $\hbar \rightarrow 0$ по этому параметру. Действительно, по формуле де Бройля при $\hbar \rightarrow 0$ длина волны де Бройля также стремится к нулю. Поэтому переход от квантовой теории к классиче-

ской в уравнении Шрёдингера можно осуществить, выполняя в нём предельный переход $\hbar \rightarrow 0$. В курсах теоретической физики анализируются результаты такого предельного перехода и доказывается, что при $\hbar \rightarrow 0$ общее временное уравнение Шрёдингера переходит в уравнение Гамильтона–Якоби классической механики.

Временное уравнение Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + U\psi$$

позволяет найти волновую функцию $\psi(x,y,z,t)$ как функцию координат и времени, определить плотность вероятности нахождения частицы в любой точке пространства в любой момент времени и тем самым полностью описать квантовое состояние частицы, движущейся в силовом поле.

В квантовой механике существует класс задач о движении в силовых полях, для которых силовая функция $U(x,y,z,t)$ явно не зависит от времени, т. е. $U(x,y,z,t) \equiv U(x,y,z)$. Такие силовые поля называются стационарными силовыми полями, а силовая функция $U(x,y,z)$ имеет смысл потенциальной энергии частицы. В стационарных полях квантовая система может находиться в состояниях с определенным значением энергии E . Эти состояния называются стационарными состояниями, а задачи о движении частиц, находящихся в таких состояниях, — стационарными задачами квантовой механики. Анализ стационарных состояний квантовых систем посвящено дальнейшее изложение в этой главе.

Найдем общий вид волновой функции, соответствующей стационарному состоянию. Поскольку $U(x,y,z)$ в уравнении Шрёдингера не зависит явно от времени, то волновую функцию $\psi(x,y,z,t)$ следует искать в виде произведения двух функций:

$$\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z)\varphi(t),$$

одна из которых — $\psi(x,y,z)$ — зависит только от координат, а другая — $\varphi(t)$ — только от времени. Подставляя волновую функцию $\psi(x,y,z)\varphi(t)$ во временное уравнение Шрёдингера и разделив обе части уравнения на $\psi(x,y,z)\varphi(t)$, получаем

$$\frac{i\hbar}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = \frac{1}{\psi} \hat{H}\psi.$$

Здесь

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(x,y,z)$$

— оператор полной энергии частицы (оператор Гамильтона).

В полученном уравнении левая часть зависит только от времени, а правая — только от координат. Выполнение такого равенства возможно лишь в случае, если левая и правая части уравнения равны постоянной величине, обозначим ее буквой E . Таким образом получаем два уравнения — одно для функции $\psi(t)$, а другое — для функции $\varphi(t)$:

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi &= E\psi; \\ i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= E\varphi.\end{aligned}$$

Уравнение $\hat{H}\psi = E\psi$ определяет собственные значения и собственные функции оператора полной энергии (гамильтониана) \hat{H} . Константа E представляет полную энергию квантово-механической системы. Перепишем уравнение с учетом вида оператора \hat{H} :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi,$$

где Δ — оператор Лапласа.

Полученное уравнение называется уравнением Шрёдингера для стационарных состояний. Его решения функции $\psi(x,y,z)$ и соответствующие значения энергии E определяются конкретным видом потенциальной энергии частицы $U(x,y,z)$. Часто уравнение Шрёдингера для стационарных состояний записывают в следующей форме:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0.$$

Для временной функции $\varphi(t)$ решение уравнения имеет вид

$$\varphi(t) = \varphi_0 e^{-i\frac{E}{\hbar}t},$$

где φ_0 — некоторая константа. Можно положить $\varphi_0 = 1$, так как функция $\varphi(t)$ входит во все выражения лишь в виде произведения с функцией $\psi(x,y,z)$, которая также определяется с точностью до произвольного множителя.

Таким образом, волновая функция частицы, находящейся в стационарном квантовом состоянии, имеет вид

$$\psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \psi(x, y, z) e^{-i\omega t}.$$

Волновая функция стационарного состояния гармонически зависит от времени с частотой

$$\omega = E/\hbar.$$

Этот результат показывает, что соотношение де Бройля $E = \hbar\omega$, первоначально применявшееся в случае свободного движения части-

цы, справедливо также и в случае движения частицы в произвольном стационарном силовом поле.

Для стационарных состояний плотность вероятности местонахождения частицы не зависит от времени:

$$w = |\psi(x, y, z, t)|^2 = |\psi(x, y, z)|^2 \left| e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \right|^2 = |\psi(x, y, z)|^2$$

(модуль показательной функции с мнимым показателем степени равен единице).

В стационарных состояниях от времени также не зависит вектор плотности потока вероятности и средние значения физических величин.

С учетом соотношения условие нормировки волновой функции

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\psi(x, y, z, t)|^2 dV = 1$$

принимает вид

$$\int_{V \rightarrow \infty} |\psi(x, y, z)|^2 dV = 1.$$

Координатную часть волновой функции $\psi(x, y, z)$ в стационарных задачах часто называют просто волновой функцией, учитывая, что зависимость от времени определяется соотношением $\varphi = \exp(-i\omega t)$.

Рассмотрим стационарное уравнение для случая, когда $U(x)$ аппроксимируется ступенчатой функцией, приведенной на рис. 3.12, в. В области U_1 волновая функция $\psi(x)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E - U_1)\psi.$$

Это же уравнение справедливо и для $U_2, U_3 \dots U_j$. Любую функцию $U(x)$ можно представить в виде набора маленьких «ступенек», поэтому U_1 можно заменить на $U(x)$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi$$

— стационарное уравнение Шрёдингера для одного измерения. Оно применимо к нерелятивистским системам при условии, что распределение вероятностей не меняется со временем; иными словами, оно справедливо в случаях, когда функции имеют вид стоячих волн. Рассмотрим несколько задач, относящихся к частице в потенциальной яме. Для нахождения стационарных состояний (стоячих волн) используем стационарное уравнение Шрёдингера.

3.7. Граничные условия

Если частица заключена в потенциальной яме, то вероятность найти ее вне ямы равна нулю. В этом случае граничное условие состоит в том, что вероятность найти частицу при больших значениях $|x|$ обращается в нуль. Такому граничному условию удовлетворяют лишь определенные значения E (будем обозначать их E_n) и соответствующие ψ_n . Значения E_n называются собственными значениями, а соответствующие волновые функции — собственными функциями.

3.7.1. Потенциальная яма конечной глубины

В п. 3.5 мы рассматривали частицу в ящике, который представлял собой потенциальную яму с бесконечно высокими стенками. С помощью уравнения Шрёдингера решим задачу о движении частицы в потенциальной яме со стенками конечной высоты U_0 (рис. 3.13, а). Нужно найти волновые функции ψ_n и энергии E_n , которые удовлетворяли бы такому граничному условию, что $\psi(x) \rightarrow 0$ при больших $|x|$.

Поскольку функция $U(x)$ является ступенчатой (см. рис. 3.13, а), то для решения задачи удобно разбить область изменения x на три участка с постоянными значениями U , получить решения для каждого участка в отдельности, а затем «сшить» их так, чтобы ψ -функция была непрерывной и гладкой.

Назовем область $-x_0 < x < x_0$ областью I и все решения в этой области снабдим индексом 1. Область $x > x_0$ назовем областью II и припишем индекс 2 решениям во второй области. Решение в области III ($x < -x_0$), из соображений симметрии, будет аналогичным решению в области II.

Уравнение Шрёдингера в области I примет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi_1}{dx^2} = E\psi_1,$$

а в области II запишется в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + U_0\psi_2 = E\psi_2.$$

Введем обозначения:

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E).$$

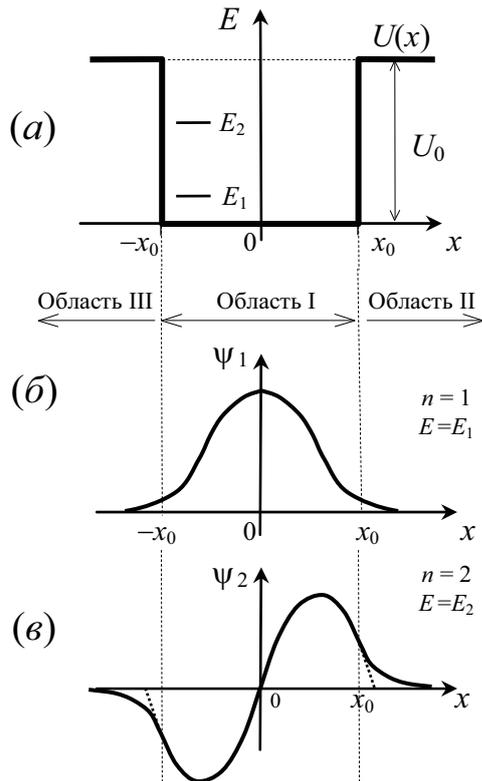


Рис. 3.13. Потенциальная яма глубиной U_0 , первый E_1 и второй E_2 энергетический уровень (а); соответствующие волновые функции ψ_1 (б) и ψ_2 (в)

Как следует, k_1^2 и k_2^2 — величины положительные ($U_0 > E$, связанные состояния). С использованием этих обозначений уравнения Шрёдингера примут простой вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 &= 0 \\ \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - k_2^2\psi_2 &= 0 \end{aligned} \right\}.$$

На рис. 3.14 кривая b иллюстрирует поведение волновой функции ψ при правильном выборе значения $E = E_1$. Если энергия E выбрана чуть меньше E_1 , то в области I $\psi(x)$ будет изгибаться медленнее, а в области II с увеличением x будет неограниченно возрастать (кривая a). Если же E выбрать несколько больше E_1 , то $\psi(x)$ будет соответствовать кривой c , т. е. в области II с увеличением x неограниченно убывает $\psi(x)$. Таким образом, все значения энергии, отличные от E_1 , не соответствуют собственным значениям волновой функции $\psi(x)$, т. к. в этом случае ψ -функция не удовлетворяет налагаемым на неё граничным условиям.

Правильное поведение, иллюстрируемое кривой b , описывается функциями, являющимися общим решением системы уравнений

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= A\cos(k_1x + \varphi) \\ \psi_2 &= Be^{-k_2x} + Ce^{+k_2x} \end{aligned} \right\},$$

где A , φ , B и C – произвольные константы.

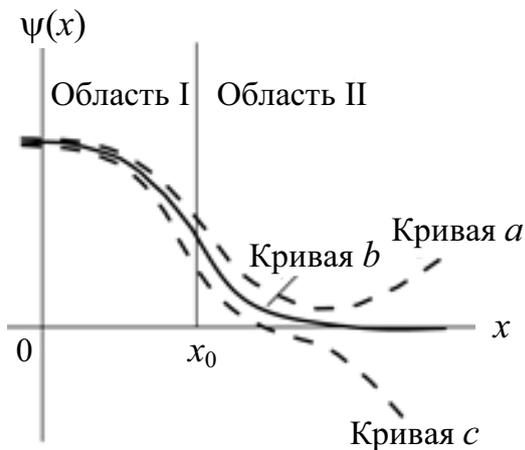


Рис. 3.14. Кривая b совпадает с кривой, приведённой на рис. 3.13, б. Кривая a соответствует случаю, когда E несколько меньше E_1 , а кривая c – когда E несколько больше E_1

Примем теперь во внимание условия, которым должна удовлетворять ψ -функция. Учтем, прежде всего, что ψ -функция должна быть всюду конечной (в том числе и при $x \rightarrow \infty$). Будем считать k_2 положительной величиной (выбор отрицательных значений вместо положительных приводит к обмену местами первого и второго слагаемого второй формулы и ничего не меняет в существе дела). Экспонента e^{+k_2x} при $x \rightarrow \infty$ неограниченно возрастает. Поэтому необходимо, чтобы $C = 0$ (для области III на рис. 3.13, б, наоборот, $B = 0$).

Из симметрии потенциальной ямы относительно начала координат функция ψ_1 при $x = 0$ должна быть максимальной ($\cos\varphi = 1$), поэтому $\varphi = 0$. Решения приобретают окончательный вид:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= A\cos(k_1x) \\ \psi_2 &= Be^{-k_2x} \end{aligned} \right\}.$$

Потребуем, чтобы ψ_1 и ψ_2 в точке x_0 были равны ($\psi_1 = \psi_2$) и переходили одно в другое без излома (т. е. $d\psi_1/dx = d\psi_2/dx$):

$$\left. \begin{aligned} A\cos(k_1x_0) &= Be^{-k_2x_0} \\ -k_1A\sin(k_1x_0) &= -k_2Be^{-k_2x_0} \end{aligned} \right\}.$$

Деля эти два равенства друг на друга, получим

$$\operatorname{tg}(k_1x_0) = \frac{k_2}{k_1}.$$

Величина x_0 определена условием задачи, а k_1 и k_2 – приведенными выше формулами. Если задаться шириной $2x_0$ и глубиной U_0 потенциальной ямы, уравнение $\operatorname{tg}(k_1x_0) = k_2/k_1$ определяет возможные значения энергии E .

Используя формулы для k_1 и k_2 , уравнение можно привести к виду

$$\operatorname{tg}(k_1 x_0) = \sqrt{\frac{U_0}{E}} - 1.$$

Определим величины

$$y_0 \equiv \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} U_0} \cdot x_0 \quad \text{и} \quad y \equiv k_1 x_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \cdot x_0.$$

Тогда

$$\operatorname{tg} y = \sqrt{\frac{y_0^2}{y^2}} - 1.$$

Уравнение может иметь несколько корней в зависимости от величины y_0 . Сравним потенциальную яму конечной глубины с бесконечно глубокой потенциальной ямой шириной $2x_0 = 10^{-10}$ м ($x_0 = 0,5 \cdot 10^{-10}$ м). Для электрона, находящегося в яме глубиной 800 эВ $= 1,28 \cdot 10^{-16}$ Дж, имеем

$$y_0 = \sqrt{2mU_0} \cdot \frac{x_0}{\hbar} = \sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,28 \cdot 10^{-16}} \cdot \frac{0,5 \cdot 10^{-10}}{1,05 \cdot 10^{-34}} = 7,27.$$

Уравнение $\operatorname{tg} y = \sqrt{y_0^2/y^2} - 1$ имеет три положительных корня: y_1 , y_3 , y_5 . Найти эти корни можно либо графически, либо методом итераций, либо методом «проб и ошибок». Корни имеют значения $y_1 = 1,38$, $y_3 = 4,11$ и $y_5 = 6,69$.

Из выражений для y_0 и y , после несложных преобразований, получим формулу для расчета собственных энергий

$$E_n = (y_n/y_0)^2 \cdot U_0.$$

Подставляя значения y_1 , y_3 и y_5 , найдем

$$E_1 = (1,38/7,27)^2 \cdot 800 = 28,8 \text{ эВ}, \quad E_3 = 256 \text{ эВ}, \quad E_5 = 678 \text{ эВ}.$$

Для $n = 2$ и $n = 4$ волновые функции в области I имеют вид $\psi_1 = A \sin k_1 x$. Сшивая граничные условия при $x = x_0$, имеем

$$\left. \begin{aligned} A \sin(k_1 x_0) &= B e^{-k_2 x_0} \\ k_1 A \cos(k_1 x_0) &= -k_2 B e^{-k_2 x_0} \end{aligned} \right\}.$$

Разделив одно соотношение на другое, получим

$$\operatorname{ctg}(k_1 x_0) = -k_2/k_1;$$

$$\operatorname{ctg} \left(\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \cdot x_0 \right) = -\sqrt{\frac{U_0}{E}} - 1 \quad \text{или} \quad \operatorname{ctg} y = -\sqrt{\frac{y_0^2}{y^2}} - 1.$$

Если $y_0 = 7,27$, то имеется два положительных корня: $y_2 = 2,75$ и $y_4 = 5,44$. Подставляя значения y_2 и y_4 в формулу $E_n = (y_n/y_0)^2 \cdot U_0$, найдем соответствующие энергии для электрона в потенциальной яме глубиной U_0 : $E_2 = 115$ эВ и $E_4 = 448$ эВ.

Как было показано выше, для ямы шириной $2x_0$ с бесконечно высокими стенками ($U_0 \rightarrow \infty$), уровни энергии определяются выражением $E_n = n^2 \cdot [\pi^2 \hbar^2 / (8mx_0^2)]$. Очевидно, что эти уровни энергии должны отличаться от уровней, рассчитанных выше для ямы конечной глубины и шириной $2x_0$.

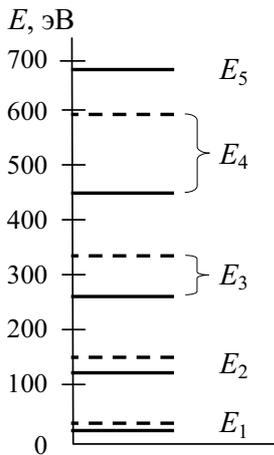


Рис. 3.15. Энергетические уровни электрона в яме шириной 10^{-10} м. Сплошные линии соответствуют потенциальной яме глубиной 800 эВ, а штриховые — потенциальной яме с бесконечно высокими стенками (то же, что и на рис. 3.9)

На рис. 3.15 для обоих случаев показаны все уровни энергии, а на рис. 3.16 — первые три волновые функции.

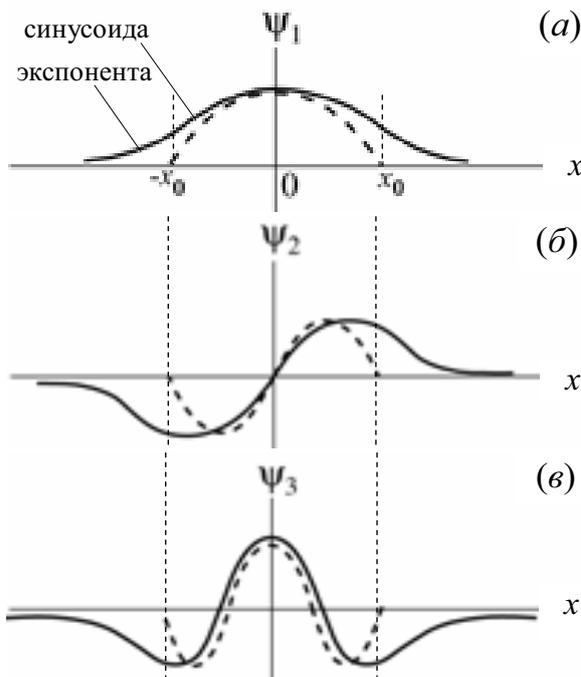


Рис. 3.16. Сплошные линии — стоячие волны низшего порядка, соответствующие энергиям E_1 , E_2 , E_3 на рис. 3.15. Штриховые линии — волновые функции в потенциальной яме той же ширины, но с бесконечно высокими стенками

Выясним причину, по которой возникает квантование энергии. Решение уравнения Шрёдингера в отдельных областях пространства:

$$\left. \begin{aligned} \psi_1 &= A \cos(k_1 x) \\ \psi_2 &= B e^{-k_2 x} \end{aligned} \right\}$$

само по себе к квантованию энергии не приводит. Квантование возникло из-за того, что мы «сшивали» волновые функции на границе областей, в которых решение описывается различными функциями: тригонометрической и экспоненциальной (рис. 3.16, *a*).

Общее решение задачи о частице, находящейся в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины, имеет практическое значение. Короткодействующие ядерные силы между нейтроном и протоном можно приближенно представить в виде прямоугольной потенциальной ямы, а затем вычислить энергию связи дейтрона и его размеры (т. е. волновую функцию дейтрона).

Предположим, что функция ψ_1 на рис. 3.13, *b* уменьшается вдвое при $x = x_0$, т. е.

$$\frac{\psi_1(x_0)}{\psi_1(0)} = \frac{1}{2}.$$

Найдем выражение для E_1 в зависимости от \hbar , m и x_0 . Поскольку $\psi_1 = A \cos k_1 x$,

$$\begin{aligned} \cos k_1 x_0 &= \frac{1}{2}; \\ k_1 x_0 &= \frac{\pi}{3}; \quad k_1 = \frac{\pi}{3x_0}; \\ \sqrt{\frac{2mE_1}{\hbar^2}} &= \frac{\pi}{3x_0}; \\ E_1 &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{18mx_0^2}. \end{aligned}$$

Потенциальная яма конечной глубины (свободные состояния). Отметим, что аналогичным образом решается задача о движении электрона над прямоугольной потенциальной ямой конечной глубины, если электрон не связан — $E > U_0$. В этом случае уравнения Шрёдингера имеют одинаковый вид для всех трех областей I–III (яма на рис. 3.13):

$$\frac{d^2 \psi_i}{dx^2} + k_i^2 \psi_i = 0.$$

Следовательно, решения являются косинусоидальными:

$$\psi_i = A_i \cos(k_i x),$$

где $i = 1, 2, 3$; $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$ и $k_2^2 = k_3^2 = 2m(E - U_0)/\hbar^2$.

Единственным различием между решениями в областях II и III и решением в области I заключается в том, что длина волны колебаний различна. В области ямы свободный электрон будет иметь меньшую длину волны ($\lambda_1 < \lambda_2$), так как его кинетическая энергия K увеличилась с $K_2 = (U_0 - E)$ до $K_1 = E$. Покинув область ямы (область I, рис. 3.13, а) электрон опять приобретает первоначальное значение K_2 и λ_2 .

Решения для различных областей должны сшиваться при $x = \pm x_0$ с обеспечением непрерывности ψ и $d\psi/dx$. Ни одно из этих решений не является неограниченно возрастающим, и поэтому не возникает аргументов, как в случае связанных электронов ($U_0 > E$), приводящих к тому, что E может иметь одно из дискретного ряда значений.

Итак, для свободных состояний E имеет непрерывный спектр разрешённых значений. Это принципиально отличается от случая связанных состояний, где имеется дискретный спектр разрешённых значений энергии (рис. 3.15).

При решении нами не учитывалось то, что на двух ступеньках потенциала при $x = \pm x_0$ происходит частичное отражение падающих волн. В результате отражение от края ямы при $x = x_0$ интерферирует с отражением от края ямы при $x = \pm x_0$, так что алгебраическая структура общего решения оказывается довольно сложной.

Имеется, однако, интересный частный случай, в котором интерференция приводит к простому результату. Поскольку отражения при $x = \pm x_0$ равны по величине и отличаются на π по фазе, то если $2x_0 = \lambda_1/2$, обе волны в точности погашаются. Действительно, в этом случае время прохождения от $-x_0$ до x_0 (где происходит отражение) и обратно к $-x_0$ (яма на рис. 3.13) равно одному периоду. Эти отражения противоположны по фазе и в результате происходит их взаимное гашение.

Таким образом, если кинетическая энергия электрона K_1 соответствует выполнению условия $2x_0 = \lambda_1/2$, то в области III (или II) не будет отражённой волны. Иными словами, через область II проходят все электроны так, как если бы ямы вообще не было.

Простая теория, изложенная здесь, объясняет эффект Рамзауэра, один из знаменитых экспериментов атомной физики (см. п. 2.11). Эффект Рамзауэра — аномальное (с позиций классической физики) взаимодействие электронов с нейтральными атомами некоторых газов (ар-

гона, криптона и ксенона), заключающееся в почти полной прозрачности этих газов для электронов с некоторым критическим значением кинетической энергии (резкое уменьшение сечения упругого рассеяния электрона при небольших (≤ 1 эВ) энергиях столкновения).

3.7.2. Потенциальный барьер (туннельный эффект)

Проникновение электрона в область отрицательной кинетической энергии невозможно проверить опытным путем для потенциала $U(x)$, изображенного на рис. 3.13. Если мы собираемся наблюдать этот эффект, то необходимо иметь информацию о том, что электрон находится вне ямы ($x > x_0$) и в то же время обладает отрицательной кинетической энергией ($E < U_0$). Мы могли бы, в принципе, сфокусировать микроскоп с достаточным разрешением (достаточно малой длиной волны света), скажем, на точке $x_1 > x_0$ рис. 3.13, б. Если бы мы «увидели» электрон, мы могли бы быть уверены, что он был вне ямы. Но у нас нет уверенности в том, что электрон имеет $K < 0$, поскольку используемый свет должен быть достаточно «энергичным», чтобы увеличить E до значения, большего U_0 .

Однако вполне возможно придумать такое $U(x)$, что это проникновение можно наблюдать, если избежать необходимости точного определения положения электрона. Электрон, приходящий слева, падает на барьер (рис. 3.17), высота ($U_0 - E$) и ширина ($x_1 - x_0$) которого достаточно малы, так что экспоненциальный хвост не затухает до нуля при $x = x_1$. В точке x_1 кинетическая энергия вновь становится положительной, а ψ — синусоидальной. Волна при $x > x_1$ не имеет такой большой амплитуды, как волна при $x < x_0$, и поэтому вероятность прохождения значительно меньше единицы, но не равна нулю. Это прохождение сквозь запрещенную классической механикой область называют туннельным эффектом.

Чтобы проверить это поразительное предсказание квантовой механики, нет необходимости точно определять положение частицы. Если мы знаем, что электрон с энергией E первоначально находился где-то в области $x < x_0$, а потом он оказался где-то в области $x > x_1$ — значит он проник сквозь барьер. Конечно, достаточно низкие и узкие барьеры получаются лишь для величин атомных и ядерных (а не макроскопических) масштабов.

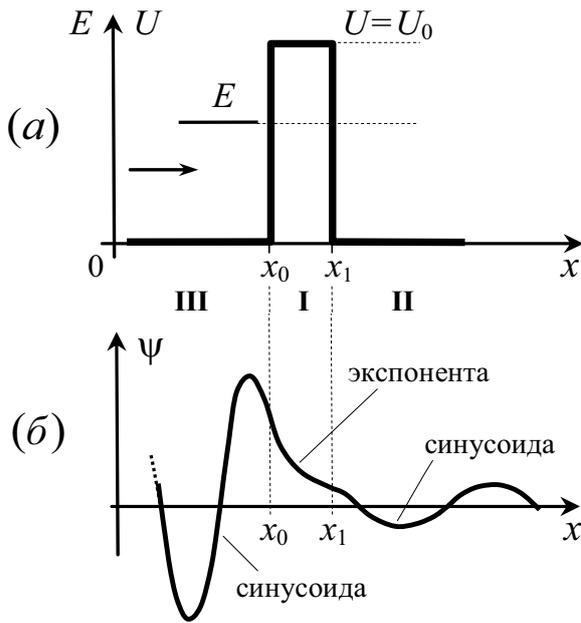


Рис. 3.17. Проникновение электронной волны сквозь барьер, высотой $(U_0 - E)$ и шириной $(x_1 - x_0)$: а – потенциальная энергия U в функции x ; б – волновые функции $\psi(x)$ для падающего слева электрона с энергией E

Задача о проникновении частиц сквозь потенциальный барьер является квазистационарной. Поэтому можно без потери общности воспользоваться решением, полученным в п. 3.7.1 для области II (рис. 3.13, $x > x_0$):

$$\psi_2 = B e^{-k_2 x}, \text{ где } k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)}.$$

Вероятность нахождения частицы определяется квадратом модуля волновой функции. Вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер равна отношению $|\psi(x_1)|^2$ при $x = x_1$ к $|\psi(x_0)|^2$ при $x = x_0$ и называется проицаемостью барьера (коэффициентом прохождения). Следовательно,

$$D = \frac{|\psi(x_1)|^2}{|\psi(x_0)|^2} = \frac{B^2 e^{-2k_2 x_1}}{B^2 e^{-2k_2 x_0}} = \exp[-2k_2(x_1 - x_0)].$$

Подставляя значение k_2 и ширину барьера $a = (x_1 - x_0)$, получим

$$D = \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right).$$

При более строгом рассмотрении задачи, необходимо учитывать не только высоту потенциального барьера $(U_0 - E)$ (коэффициент $k_2^2 = 2m(U_0 - E)/\hbar^2$), но и полную энергию налетающей частицы (коэффициент $k_1^2 = 2mE/\hbar^2$).

Коэффициент прохождения D частицы через потенциальный барьер в этом случае принимает вид

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right),$$

где коэффициент

$$D_0 \approx \frac{16k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2} = 16 \frac{E}{U_0} \left(1 - \frac{E}{U_0}\right)$$

медленно изменяется в зависимости от E/U_0 и по порядку величины сравним с единицей. Основной вклад в D дает экспонента. При оценке коэффициента прохождения через потенциальный барьер обычно полагают $D_0 \approx 1$.

Вероятность туннельного эффекта экспоненциально зависит от ширины a и высоты $(U_0 - E)$ барьера и массы частицы m . Найдем эффективную глубину проникновения частицы $x_{\text{эфф}} = (x - x_0)$ в область потенциального порога – расстояние от границы порога, на котором вероятность обнаружения частицы уменьшается в $e = 2,718$ раз. Из определения следует, что

$$D = \frac{|\psi(x)|^2}{|\psi(x_0)|^2} = \exp\left(-\frac{2x_{\text{эфф}}}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right) = e^{-1}$$

или

$$\frac{2x_{\text{эфф}}}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)} = 1.$$

Находим

$$x_{\text{эфф}} = \frac{\hbar}{\sqrt{8m(U_0 - E)}}.$$

В случае электрона, налетающего на потенциальный порог, для которого $(U_0 - E) = 1$ эВ, получаем

$$x_{\text{эфф}} = \frac{1,05 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{8 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}} \approx 10^{-10} \text{ м} = 1 \text{ \AA},$$

Величина $x_{\text{эфф}}$ в этом случае соизмерима с размерами атома.

Рассмотрим потенциальный барьер произвольной формы. Представим его в виде большого числа узких прямоугольных потенциальных барьеров, расположенных друг за другом (рис. 3.18).

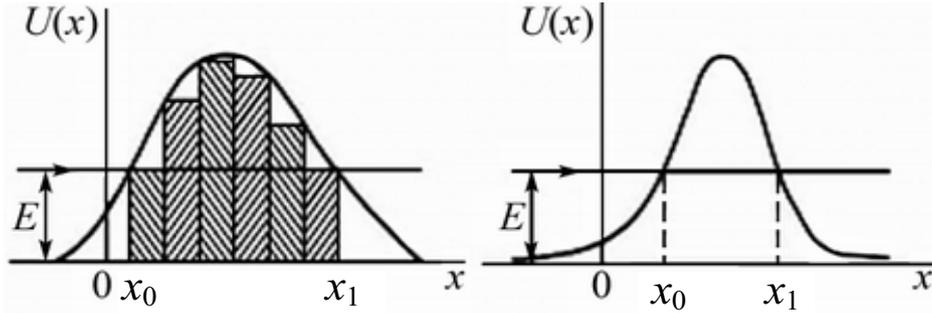


Рис. 3.18. Потенциальный барьер произвольной формы можно представить в виде последовательности узких прямоугольных потенциальных барьеров

Пусть барьер имеет плавную форму — его высота на расстоянии, сравнимом с длиной волны де Бройля, изменяется незначительно. В этом случае отражением волны на выступающих участках прямоугольных барьеров можно пренебречь. Ослабление волны происходит, в основном, за счет поглощения.

Волна де Бройля, прошедшая через прямоугольный i -барьер, представляет собой волну, падающую на $(i + 1)$ -барьер и т. д. Вероятность прохождения частицы через цепочку последовательно расположенных потенциальных барьеров равна произведению вероятностей прохождения через каждый из барьеров.

Коэффициент прохождения D равен произведению коэффициентов прохождения D_i для каждого барьера:

$$D = \prod_i D_i \approx \prod_i \exp \left\{ \frac{-2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m[U(x_i) - E]} \right\} = \\ = \exp \left\{ -\sum_i \frac{2\Delta x_i}{\hbar} \sqrt{2m[U(x_i) - E]} \right\},$$

где Δx_i — ширина, а $U(x_i)$ — высота i -барьера.

Переходя от суммирования к интегрированию, получаем

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_1} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\}.$$

Здесь x_0 и x_1 — значения координат, при которых $U(x) = E$.

В дальнейшем мы рассмотрим ряд примеров туннельного эффекта при изучении движения электронов в молекулах и твердых телах, холодной эмиссии электронов и явления радиоактивности. Например, в гл. 6 (п. 6.9) рассмотрен туннельный эффект на потенциальном барьере треугольной формы при автоэлектронной эмиссии.

3.8. Гармонический осциллятор

Решим квантовую задачу о движении частицы массой m под действием гармонической силы $F = -kx$ (здесь k – коэффициент упругости, а не волновое число). Для сравнения квантовых результатов с классическими напомним, что классическое решение задачи можно найти, подставляя $F = -kx$ во второй закон Ньютона: $m(d^2x/dx^2) + kx = 0$. Решение этого уравнения имеет вид $x = x_0 \cdot \sin(\omega_{\text{кл}} t)$, где $\omega_{\text{кл}} = \sqrt{k/m}$ – классическая угловая частота гармонических колебаний. В классическом случае частица совершает гармонические колебания с угловой частотой $\omega_{\text{кл}}$, а её потенциальная энергия $U(x) = kx^2/2 = m\omega_{\text{кл}}^2 x^2/2$ может принимать любое значение, в том числе равное нулю.

В квантовой механике наличие граничных условий при небольших $|x|$ приводит к тому, что разрешен лишь набор энергий:

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_{\text{кл}}, \text{ где } n = 0, 1, 2, 3 \dots^*)$$

Выполним сначала приближённые расчеты. Они проиллюстрируют основные методы квантово-механических вычислений.

Воспользуемся законом сохранения энергии. В квантовой механике среднее значение полной энергии $\langle E \rangle$ равно сумме средних значений кинетической $\langle K \rangle$ и потенциальной энергии $\langle U \rangle$, т. е. $\langle E \rangle = \langle K \rangle + \langle U \rangle$. Это утверждение не эквивалентно утверждению классической физики о равенстве численных значений E и $(K + U)$. При обсуждении этого различия следует помнить, что кинетическая энергия зависит от импульса, а потенциальная энергия – от координат частицы. В силу соотношения неопределенности потенциальная и кинетическая энергия частицы не могут одновременно иметь определенных значений, так что простое числовое равенство в духе классической физики невозможно. Формула $\langle E \rangle = \langle K \rangle + \langle U \rangle$ показывает, однако, что классическая связь сохраняется между средними значениями E , K и U . Обозначения среднего опускают для простоты записи.

Решим эту задачу по аналогии с задачей о частице в потенциальной яме. Согласно рис. 3.19 ширина потенциальной ямы $L = 2x_0$, где x_0 – максимальное смещение, или амплитуда колебаний. В случае стоячей волны порядка n на отрезке длиной L уложится n полуволн:

$$n\langle \lambda_n \rangle / 2 = 2x_0 \text{ или } \langle \lambda_n \rangle = 4x_0 / n;$$

^{*)} Можно с равным успехом записать $E_n = (n - 1/2)\hbar\omega$, и тогда отсчет ведется с $n = 1$.

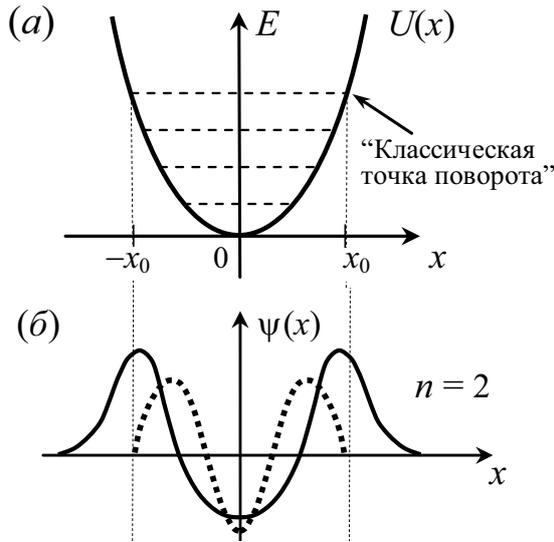


Рис. 3.19. Потенциальная энергия гармонического осциллятора (а); б – стоячая волна второго порядка (сплошная линия – точное решение; штриховая линия – приближённое решение)

$$\langle p \rangle = \frac{2\pi\hbar}{\langle \lambda_n \rangle} = \frac{2\pi\hbar}{4x_0/n} = n \frac{\pi\hbar}{2x_0}.$$

Средняя кинетическая энергия равна:

$$\langle K \rangle = \frac{\langle p \rangle^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8mx_0^2} \cdot n^2.$$

Средняя полная энергия $\langle E \rangle$ в гармоническом осцилляторе в два раза превосходит эту величину:

$$\langle E \rangle = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4mx_0^2} \cdot n^2.$$

Она также равна значению потенциальной энергии в «классической точке поворота» (рис. 3.19):

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2} m \omega_{\text{кл}}^2 x_0^2.$$

Перемножим два последних равенства:

$$\langle E \rangle^2 = \frac{\pi^2}{8} \cdot n^2 \hbar^2 \omega_{\text{кл}}^2.$$

Для наших приближенных оценок можно считать, что $\pi^2/8 \approx 1$, тогда

$$E_n \approx n\hbar\omega_{\text{кл}}, \text{ где } n = 1, 2, 3 \dots$$

Точные вычисления приводят к следующим значениям энергии:

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_{\text{кл}}, \text{ где } n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

Здесь $E_0 = \hbar\omega_{\text{кл}}/2$ – энергия квантово-механического движение частиц (например, атомов в твёрдом теле) при $T = 0$ К (энергия нулевых колебаний).

Выполним вычисления с помощью уравнения Шрёдингера. Подставим в него величину потенциальной энергии частицы $U(x) = m\omega_{\text{кл}}^2 x^2/2$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m\omega_{\text{кл}}^2 x^2 \right) \psi.$$

Поскольку надо найти решение с меняющейся длиной волны, используем функцию Гаусса. «Угадывание», основанное на знании физических явлений, служит общепринятым способом поиска решений дифференциальных уравнений. Запишем волновую функцию в виде

$$\psi(x) = e^{-ax^2}.$$

Проверим, удовлетворяет ли эта функция уравнению Шрёдингера. Возьмем вторую производную и подставим ее в левую часть уравнения:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -2ae^{-ax^2} + 4a^2x^2e^{-ax^2}.$$

Подставим выражение для $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ в уравнение Шрёдингера:

$$\begin{aligned} (-2a + 4a^2x^2)e^{-ax^2} &= -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2} m\omega_{\text{кл}}^2 x^2 \right) e^{-ax^2}; \\ -2a + (4a^2)x^2 &= -\frac{2mE}{\hbar^2} + \left(\frac{m^2\omega_{\text{кл}}^2}{\hbar^2} \right) x^2. \end{aligned}$$

Приравнявая коэффициенты при x^2 , находим

$$4a^2 = \frac{m^2\omega_{\text{кл}}^2}{\hbar^2}; \quad a = \frac{m\omega_{\text{кл}}}{2\hbar}.$$

Из сравнения свободных членов следует:

$$\begin{aligned} -2a &= -2mE / \hbar^2; \\ E &= \frac{\hbar^2 a}{m} = \frac{\hbar^2}{m} \frac{m\omega_{\text{кл}}}{2\hbar} = \frac{\hbar\omega_{\text{кл}}}{2}. \end{aligned}$$

Функция Гаусса является решением при условии, что

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega_{\text{кл}}.$$

В этом случае

$$\psi_0(x) = e^{-(m\omega_{\text{кл}}/2\hbar)x^2}.$$

Путем подстановки в уравнение Шрёдингера можно убедиться, что решением, соответствующим стоячей волне второго порядка, будет

$$\psi_1(x) = x e^{-(m\omega_{\text{кл}}/2\hbar)x^2}.$$

Эта функция является решением для энергетического уровня $E_1 = 3\hbar\omega_{\text{кл}}/2$. Следует заметить, что расстояние между двумя соседними уровнями энергии равно $(E_2 - E_1) = \hbar\omega_{\text{кл}}$. Это относится и к более высоким уровням, которые описываются выражением

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_{\text{кл}}, \text{ где } n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

Таким образом, гармонический осциллятор испускает фотоны, частота которых совпадает с частотой колебаний классического осциллятора, когда происходит переход между соседними уровнями.

3.9. Оптика и квантовые свойства света

Обоснование принципа Ферма, законов геометрической и волновой оптики даёт квантовая электродинамика. В квантовой электродинамике подтверждается гипотеза Ньютона (оптика, 1666 г.), что свет — это частицы (корпускулы, по Ньютону), называемые фотонами. Наиболее прямой опыт, подтверждающий это, — регистрация света с помощью фотоэлектронного умножителя (ФЭУ), подключенного через усилитель к динамику. По мере того как интенсивность света уменьшается, ФЭУ срабатывает все реже и реже, но не тише и тише, как должно было бы быть при волновой природе света.

Рассмотрим подход к описанию света с точки зрения его квантового поведения на примере его отражения от тонкой пластинки (рис. 3.20). Пусть 100 фотонов летят к стеклу, 4 из них отражаются, 96 проходят в стекло (рис. 3.20). Какие 96 из 100 пройдут, неизвестно. Природа позволяет вычислить только вероятность процесса отражения для каждого фотона. Для стекла конечной толщины можно ожидать, что от его верхней и нижней поверхности отразится по 4 фотона, и всего мы зарегистрируем 8 отраженных фотонов (рис. 3.21). Но опыт показывает, что иногда действительно отражается 8 фотонов, но в зависимости от изменения толщины стекла отраженных фотонов бывает 15 или 16, а иногда 1 или 2, или в ФЭУ ничего не попадает. Результат отражения зависит от небольших колебаний толщины пластинки. У самой тонкой пластинки число отраженных фотонов всегда близко к нулю. Если пластинка более толстая, то фотонов в A (ФЭУ) ближе к 8. Если пластинку взять еще толще, то число фотонов в A достигнет максимального значения — 16.

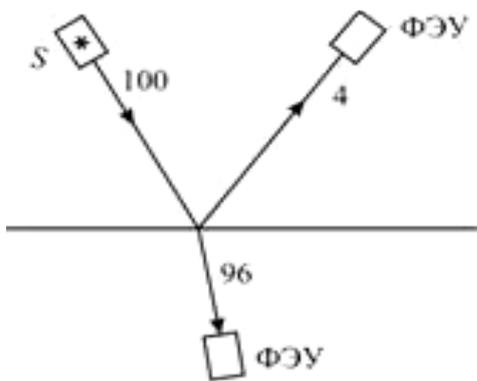


Рис. 3.20. Отражение фотонов от тонкой пластинки

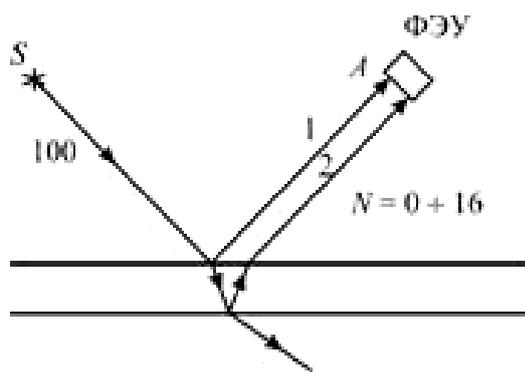


Рис. 3.21. Отражение света от стекла конечной толщины; N – число отражённых фотонов

При последующем увеличении толщины пластинки число фотонов в A начнет уменьшаться и при какой-то определенной толщине фотонов их не будет вообще (рис. 3.22).

Ньютон обнаружил эти колебания и поставил эксперимент, который мог бы быть правильно интерпретирован с позиций волновой оптики, а число периодических усилений и ослаблений для отраженного зеленого монохромного света могло достигать ≈ 34000 , т. е. для пластинок толщиной до 1 мм. Современный лазерный источник монохроматического света позволяет зарегистрировать 10^8 циклов, что соответствует толщине стеклянной пластинки в 50 м. На протяжении многих лет после Ньютона частичное отражение света объясняли с помощью волновой теории. Она давала результаты, соответствующие опыту, т. к. волны могут усиливать и гасить друг друга. Но из этой теории следовало, что по мере уменьшения интенсивности света сигналы от ФЭУ будут слабее и слабее, а они становятся реже и реже. Свет ведет себя, как частица, но частица не классическая, а квантовая.

Неизвестно, какой из фотонов отразится или пролетит через стекло. Но можно вычислить вероятность отражения света от стекла данной толщины. Вероятность события равна квадрату модуля волновой функции $|\Psi|^2$, длину которой можно изобразить стрелкой величиной $|\Psi|$, причем эта стрелка вращается против хода часов за счет наличия фазового множителя. Для фотонов фазовый множитель может быть записан в виде

$$\exp\left(i\frac{E}{\hbar}t\right),$$

где $\frac{E}{\hbar}t$ – фаза колебаний; $\omega = \frac{E}{\hbar}$ – частота вращения, которая примерно равна 10^{15} с^{-1} (зелёный свет). Для стекла $|\psi|^2 = 0,04$, $|\psi| = 0,2$. Вероятность для фотонов попасть в A от двух поверхностей (рис. 3.21) равна $P = |\psi_3|^2 = |\psi_1 + \psi_2|^2$, т. е. вероятность равна квадрату длины стрелки $|\psi_3|$ (см. рис. 3.22, *а*, *б*, *в*). При этом стрелка, отражающаяся от передней поверхности, изменяет свою фазу на π , т. е. направление стрелки, изображающее $|\psi_1|$, изменяется на противоположное.

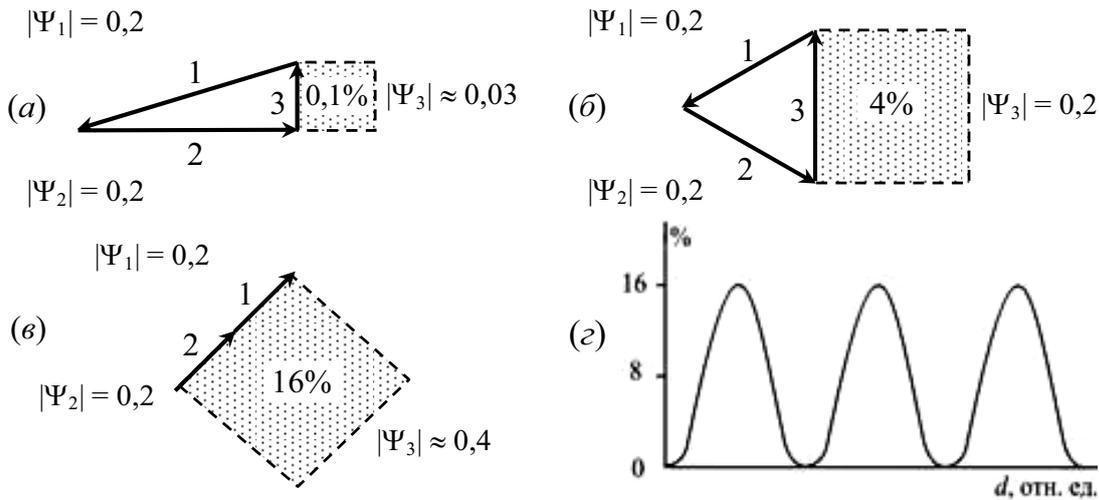


Рис. 3.22. Зависимость числа (%) отражённых фотонов от толщины стеклянной пластинки: очень тонкая пластинка (*а*); более толстая пластинка (*б*); ещё более толстая пластинка (*в*); непрерывное изменение толщины пластинки (*г*)

В качестве примера рассмотрим отражение света от очень тонкого стекла (рис. 3.22, *а*). Величина P будет определяться геометрической суммой ψ_1 и ψ_2 , направленных почти точно в противоположные стороны так, что длина результирующей стрелки равна $\psi_3 = 0,03$.

Для более толстого стекла: площадь квадрата, построенного на стрелке 3 , дает полную вероятность отразиться от двух поверхностей (рис. 3.22, *б*). Для ещё более толстого стекла (рис. 3.22, *в*) стрелки 1 и 2 могут быть направлены по одной прямой и вероятность отражения будет максимальной – 16 %.

Если стекло еще толще, то опять можно прийти к случаю, когда вероятность отражения начнет падать, достигнет нуля, затем вновь начнет расти и т. д. (рис. 3.22, *г*). Воспользовавшись правилами вычисления вероятности попадания фотона в детектор (интенсивности света в точке наблюдения), получим законы геометрической оптики и вместе с тем обоснование принципа Ферма.

3.9.1. Законы геометрической оптики

Квантовая электродинамика разрешает вопрос о корпускулярно-волновом дуализме света, утверждая, что свет состоит из частиц — фотонов, как и считал в свое время Ньютон. Оказывается, можно вычислить только вероятность того, что свет попадет в детектор (точку наблюдения).

Закон отражения света. Пусть свет испускается источником S и попадает в точку наблюдения A , отразившись от зеркала MN (рис. 3.23). Причем прямой путь из S в A отсутствует, например, из-за наличия перегородки Q .

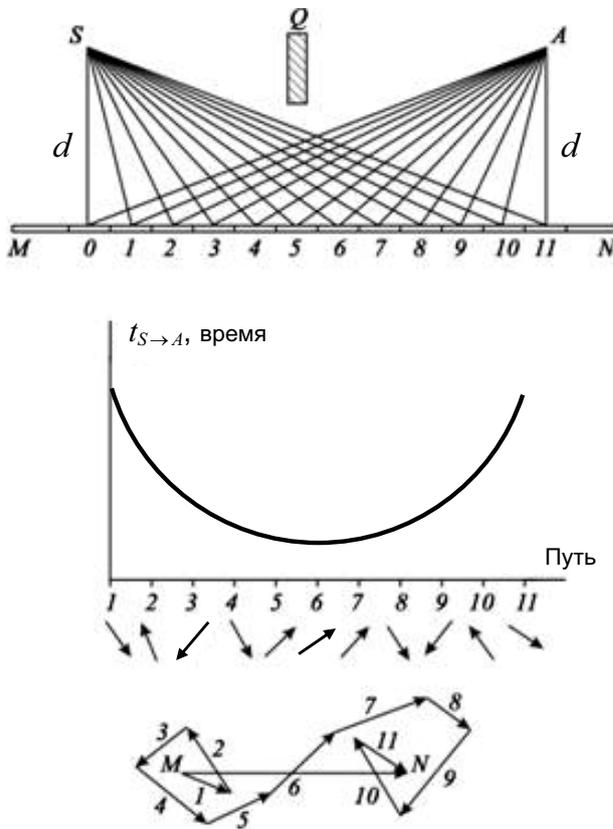


Рис. 3.23. Наверху показаны пути прохождения света от источника S к детектору A . На графике отложено время прохождения света от S к A . Под графиком изображены стрелками волновые функции с соответствующими фазовыми множителями для каждого из путей 0–11. Внизу — результат сложения всех стрелок. Основной вклад в результирующую вероятность (стрелка MN) дают пути, требующие для своего прохождения почти одинаковое время (5–7)

Полная вероятность обнаружить свет, исходящий от источника S к A , определяется квадратом модуля суммы амплитуд вероятностей прохождения света из точки S в A по всем возможным путям 0–11 (рис. 3.23) с отражением от зеркала MN :

$$P = \left| \sum_j \Psi_j(r) \exp\left(i \frac{E}{\hbar} t_j\right) \right|^2,$$

где $\Psi_j(r) \sim 1/r_j$ для точечного источника фотонов.

Согласно рис. 3.23 наибольший вклад в P даёт сумма амплитуд от середины зеркала, где угол падения равен углу отражения и время про-

хождения из точки S в A при отражении от зеркала MN наименьшее. Все остальные вклады амплитуд в P взаимно гасятся, т. к. при небольшом смещении пути от середины зеркала происходит резкое изменение фазы в складываемых для P .

Если d расстояние от источника S до зеркала — MN , то область зеркала, отражающая свет с энергией кванта $E = h\nu$, имеет линейные размеры в районе точки b , равные $\Delta x = \sqrt{2\pi d\hbar c/E} = 2 \cdot 10^{-3}$ м; геометрическая разность хода $\Delta x^2/d$ равна $\lambda/2$. Формула получена с учётом изменения фазы на π (потеря $\lambda/2$ при отражении).

Свет, таким образом, от S к MN и в A распространяется как бы в виде узкого луча, что совпадает с представлениями геометрической оптики. Наши представления о том, что свет на пути от S к A использует для прохождения все траектории можно проверить, например, затемнив на зеркале участки 0, 3, 7, 9, 11, т. е. участки, где амплитуды ψ_j дают вклады, находящиеся в противофазе с областью 5–7. При этом гашение интенсивности за счёт интерференции амплитуд заметно уменьшается, и величина P , и интенсивность света в точке A заметно увеличатся. Такое зеркало с рядом нанесённых штрихов представляет дифракционную решётку. Для фотонов с разной энергией E точки наблюдения A с максимальной интенсивностью имеют различное местоположение. Но чтобы зеркало работало как зеркало, важна вся его поверхность, обеспечивающая гашение всех боковых лучей и выполнение закона отражения, сформулированного в геометрической оптике.

Прямолинейность распространения света. Пусть источник находится в точке S , и мы хотим определить интенсивность света в точке A с помощью детектора (ФЭУ) (рис. 3.24).

На графике приведена зависимость времени движения фотона от источника S к детектору A по различным траекториям. Под осью абсцисс указаны ориентации амплитуд вероятностей прохождения фотонов по различным траекториям:

$$\psi_k(r) \exp\left(i \frac{E}{\hbar} t_k\right),$$

где \vec{SA} — результирующая амплитуда вероятностей прохождения фотона из S в A .

Результирующая вероятность обнаружить фотон, вышедший из S в A , равна

$$P = \left| \sum_k \psi_k(r) \exp\left(i \frac{E}{\hbar} t_k\right) \right|^2.$$

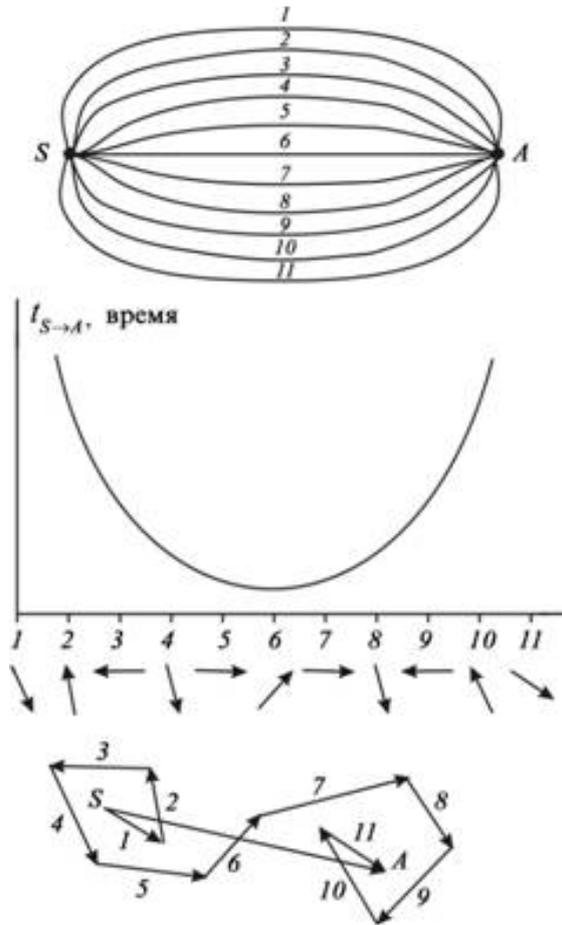


Рис. 3.24. Верхняя часть изображает возможные траектории движения фотона от источника S к детектору A . На графике отложено время прохождения света от S к A . Под графиком изображены стрелками волновые функции с соответствующими фазовыми множителями для каждого из путей 0–11. Внизу – результат сложения всех стрелок. Основной вклад в результирующую вероятность (стрелка SA) дают пути, требующие для своего прохождения почти одинаковое время (5–7)

Для траекторий движения вблизи прямой 6 время прохождения фотонов из S к A минимально, и оно не будет изменяться в первом порядке разложения $\exp\left(i\frac{E}{\hbar}t_k\right)$ по t .

Слагаемые вблизи 6-й траектории (траектории с экстремальным временем прохождения) имеют почти одинаковые фазовые множители. Соответствующие амплитуды вероятностей входят в результирующую вероятность P с одинаковым знаком (изображающие их на рис. 3.24 стрелки имеют одну ориентацию), и они дадут основной вклад в P . Размеры этой траектории можно оценить из следующего условия. Если соседний с 6 путь будет иметь длину Δ , большую на половину длины волны $\lambda/2$, то время прохождения по нему изменит показатель фазового множителя на π и данное слагаемое будет входить в P в противофазе и приводить к уменьшению P , т. е. $\Delta = \lambda/2 \leq c\tau$, $2\pi\nu\tau < \pi$, $2\pi\nu = E/\hbar$, откуда $\Delta < \pi\hbar/E$. Это соответствует линейным размерам луча 2 (рис. 3.25), равным $2x = 2\sqrt{\Delta r} = 2\sqrt{\pi\hbar r/E} \approx 10^{-3}$ м ($E = 3$ эВ, $r = 1$ м).

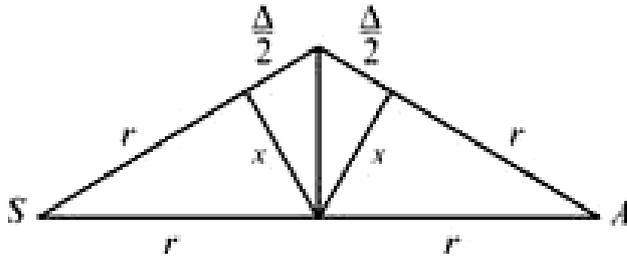


Рис. 3.25. Линейные размеры луча $2x$ равны $(2\lambda r)^{1/2}$

Свет движется практически по прямой в узком канале с линейными размерами порядка одного миллиметра. Отметим, что единственная стрелка, соответствующая кратчайшему пути прохождения (6-й путь) из S в A , не в состоянии объяснить прямолинейность распространения света. Важную роль играют «почти» прямые траектории. Свет на самом деле распространяется не только по прямой, он «просматривает» соседние траектории и использует для своего прохождения небольшую часть пространства, где путь длиннее не больше, чем на $\pi\hbar/E$ с линейными размерами этой области ≈ 1 мм. Если мы попытаемся «сжать» луч света, например, двумя кубиками Q (рис. 3.26), то произойдет следующее. При расстоянии между кубиками Q : $2x \geq 1$ мм свет будет распространяться по прямой (рис. 3.26).

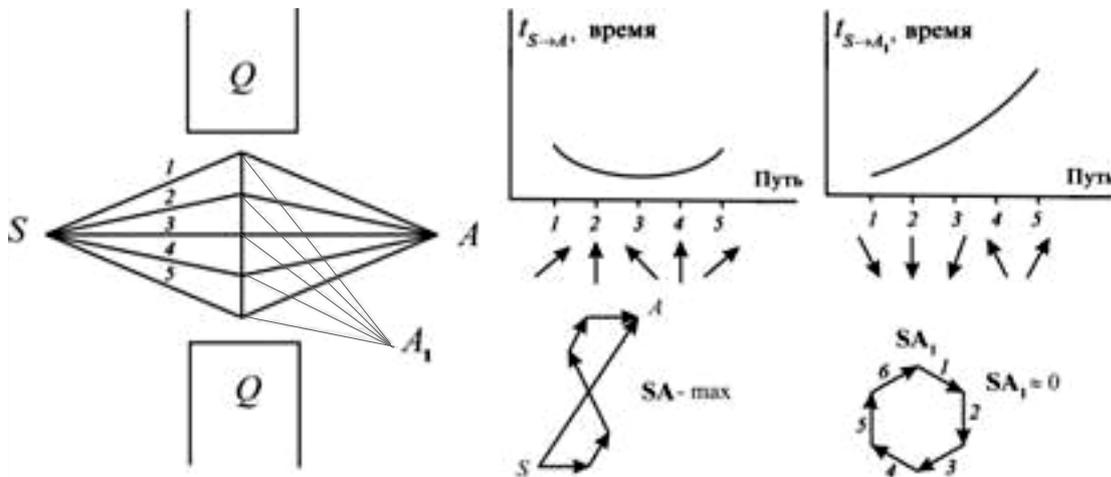


Рис. 3.26. Сжатие луча кубиками Q . Расстояние между Q равно $2x \geq 1$ мм. Луч проходит по прямой SA , в точку A_1 почти не попадает фотонов

При расстоянии $2x \geq 1$ мм фотоны попадают в точку A , но почти не попадают в точку A_1 , т. е. свет продолжает распространяться почти по прямой в узком канале. По мере сближения кубиков Q ситуация существенно изменится (рис. 3.27). Желание сжать пучок света, чтобы он распространялся по прямой, приводит к его расширению.

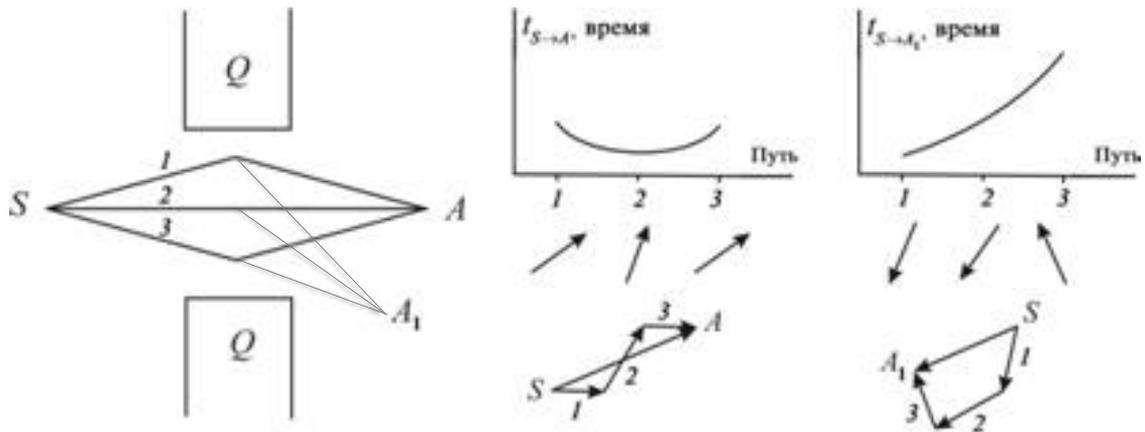


Рис. 3.27. По мере сжатия кубиков Q , для прохождения света из S в A и A_1 остаётся всё меньше траекторий и соседние траектории не могут погасить свет в точке A_1 ; он имеет вполне заметную амплитуду вероятности попадания из S в A_1

Таким образом, предположение, что свет распространяется по прямой – это удобное представление знакомого нам мира. Оно подобно грубому приближению, согласно которому угол отражения от зеркала равен углу падения. На самом деле свет распространяется не только по прямой. Он «просматривает» соседние траектории вокруг нее и использует небольшую часть ближайшего пространства для своего прохождения. По этой же причине и зеркало должно быть достаточного размера, чтобы нормально отражать: если зеркало слишком мало для пучка соседних траекторий, свет рассеивается во многих направлениях, куда бы мы ни поставили зеркало.

Фокусировка света. Можно значительно увеличить интенсивность света от источника S в точке наблюдения A (рис. 3.26), если создать условия, когда свет, двигаясь по различным траекториям, будет затрачивать на прохождение одинаковое время и, таким образом, все слагаемые в выражении для P будут иметь одинаковую фазу. Указанное замедление для прохождения света из S в A можно получить, поместив между S и A какую-либо среду, где скорость распространения света меньше, чем в вакууме.

Указанная среда должна иметь поверхность с переменной толщиной, чтобы траектории, далекие от центра O (рис. 3.28), имели почти то же время для прохождения фотонов из S в A , что и в свободном пространстве, но фотоны, идущие близко к центру O , максимально замедлялись, т. е. в точке M стекло должно быть тонким, а в районе точки O – толстым. Если тщательно рассчитать форму поверхности, то получим

поверхность, описываемую уравнением четвертого порядка. Для лучей, идущих вблизи 0 , эта поверхность хорошо аппроксимируется двумя сферами. Стрелки для каждого пути будут иметь в точке A одно направление — волновые функции имеют одну фазу и результирующая вероятность обнаружить кванты света в точке A будет очень велика.

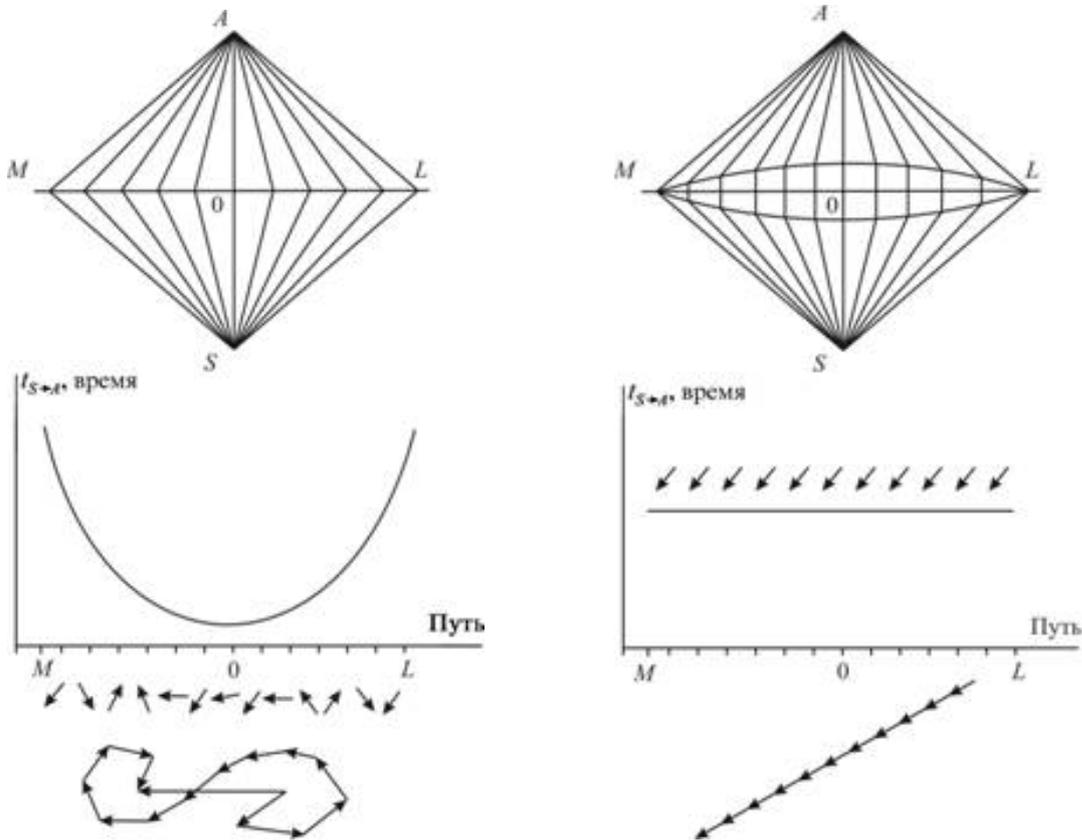


Рис. 3.28. В верхней части рисунка плоская проекция картины прохождения света от источника S к детектору A по ломаным траекториям. Наибольший вклад в вероятность попадания света из S в A дают траектории вблизи минимума времени прохождения (или максимума). Свет можно «сконцентрировать» в A , замедлив свет, идущий по более коротким траекториям. Для этого используют стекло переменной толщины с такой формой поверхности, чтобы прохождение света по любой траектории занимало одно и то же время. При этом все стрелки в A имеют одно направление — волновые функции имеют одну фазу. Амплитуда вероятности обнаружить фотон в A очень сильно возрастает

Толщина стекла при переходе от точки M к O плавно увеличивается. В случае фокусирующей линзы максимальная интенсивность в точке A получается не из условия экстремальности времени прохождения света из S в A , а из условия стационарности времени прохождения по всем возможным траекториям.

Преломление света. Если свет распространяется из точки S среды 1 к детектору A , находящемуся в среде 2 , то, как и в случае с зеркалом при прямолинейном распространения света, он испытывает все возможные траектории и «выбирает» из них ту, которая потребует для своего прохождения наименьшего времени (рис. 3.29). Вблизи этой траектории вклад амплитуд вероятностей будет компенсирован в наименьшей степени, поскольку вблизи экстремальных и стационарных точек фазовые множители в первом порядке разложения в ряд по степеням малости остаются неизменными и дают наибольший вклад в вероятность попадания света из S в A . Этот путь, ввиду различия скоростей света v_1, v_2 в средах 1 и 2 , уже не будет прямой линией, а превратится в ломаную.

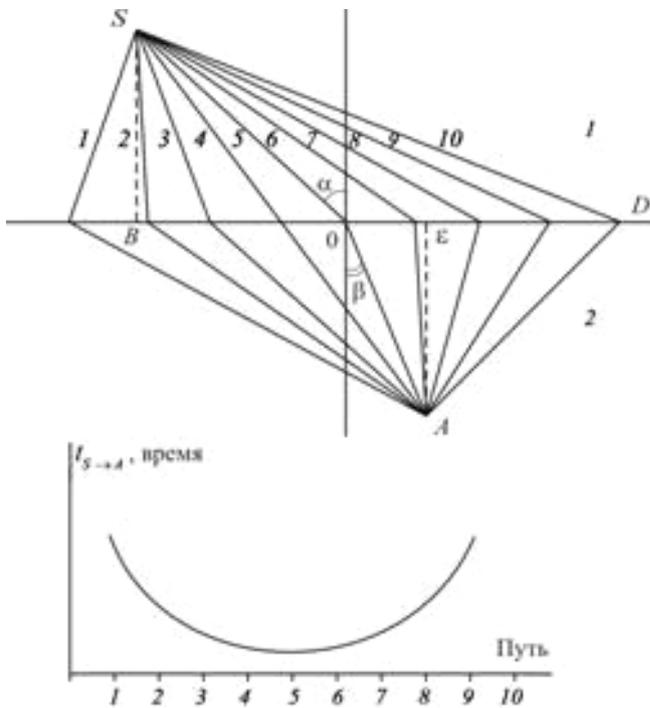


Рис. 3.29. Прохождение света из среды 1 со скоростью v_1 в среду 2 со скоростью v_2 .

Кратчайший геометрический путь 4 не является оптимальным ввиду различия скоростей света в средах 1 и 2 . Зависимость времени прохождения t от пути является кривой с минимумом. Наибольший вклад в результирующую вероятность прохождения света из точки S в A вносят те траектории, для которых время будет минимальным, поскольку они имеют почти равные фазовые множители

Ход лучей из точки S среды 1 в точку A среды 2 можно определить из условия минимальности времени прохождения света по траектории SOA (рис. 3.29):

$$t = \frac{\overline{SO}}{v_1} + \frac{\overline{OA}}{v_2}; \quad x = \overline{BO};$$

$$\overline{SO} = \sqrt{x^2 + \overline{SB}^2}; \quad \overline{OA} = \sqrt{(\overline{EB} - x)^2 + \overline{EA}^2};$$

$$\frac{dt}{dx} = \frac{x}{v_1 \sqrt{\overline{SB}^2 + x^2}} - \frac{(\overline{EB} - x)}{v_2 \sqrt{(\overline{EB} - x)^2 + \overline{EA}^2}} = 0;$$

$$\frac{\sin \alpha}{v_1} = \frac{\sin \beta}{v_2}.$$

Отсюда мы получаем закон Снеллиуса:

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{v_1}{v_2} = n_{21}, \quad n_{21} = \frac{n_2}{n_1}, \quad n_1 = \frac{c}{v_1}, \quad n_2 = \frac{c}{v_2},$$

где величина n_{21} носит название относительного показателя преломления: $n_1 = c/v_1$, $n_2 = c/v_2$ — показатели преломления сред 1 и 2 относительно вакуума.

3.9.2. Регистрация фотонов (эффект Ханбэри–Брауна–Твисса)

Относительные величины фазовых множителей в сумме для P — полной вероятности событий — можно менять, изменяя расстояние между источниками или детекторами: сдвигая или раздвигая детекторы, можно увеличить или уменьшить вероятность события. Это явление, получившее название эффект Ханбэри–Брауна–Твисса, используют, чтобы различить единичные и двойные источники радиоволн в далёком космосе, даже если составляющие двойного источника находятся очень близко друг к другу. Пусть X и Y — два источника электромагнитных волн, находящихся на расстоянии D друг от друга, расстояние от X до детектора A на Земле равно L и от Y до детектора B на Земле также равно L , расстояние между детекторами A и B равно d (рис. 3.30).

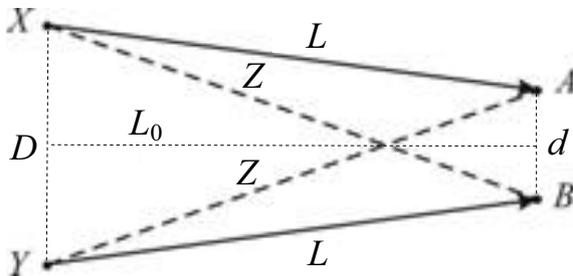


Рис. 3.30. Событие, состоящее в регистрации сигнала детекторами A и B может осуществиться двумя способами. Фотон из X попадает в A и фотон из Y — в B . Но есть и второй способ: фотон из X попадает в B , а фотон из Y — в A

Вероятность регистрации детекторами A и B электромагнитных волн, испущенных источниками X и Y , равна

$$P_{AB}^{(1)} = P(X \rightarrow A) \cdot P(Y \rightarrow B) = \left| \psi_X e^{-i\varphi_{XA}} \cdot \psi_Y e^{-i\varphi_{YB}} \right|^2,$$

где $P(X \rightarrow A)$ — вероятность попадания фотона от источника X в детектор A ; $P(Y \rightarrow B)$ — вероятность попадания фотона от Y — в B .

Но есть и другой способ:

$$P_{AB}^{(2)} = P(X \rightarrow B) \cdot P(Y \rightarrow A) = \left| \psi_X e^{-i\varphi_{XB}} \cdot \psi_Y e^{-i\varphi_{YA}} \right|^2$$

— фотон от источника X попадает в детектор B , а от источника Y — в A .

Полная вероятность события складывается из амплитуд вероятностей этих двух способов, просуммированных и взятых по модулю в квадрате:

$$P_{AB} = |\psi_X e^{-i\varphi_{XA}} \psi_Y e^{-i\varphi_{YB}} + \psi_X e^{-i\varphi_{XB}} \psi_Y e^{-i\varphi_{YA}}|^2 =$$

$$= |\psi_X \psi_Y|^2 \left| 1 + e^{-i(\varphi_{XA} + \varphi_{YB} - \varphi_{XB} - \varphi_{YA})} \right|^2.$$

Обозначим: $XA = YB = L$; $XB = YA = Z$; фаза $\varphi = \omega t = (E/\hbar)(x/c)$, где x – путь, пройденный фотоном. Тогда фазы соответствующих событий равны:

$$\varphi_{XA} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{L}{c}; \quad \varphi_{YB} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{L}{c}; \quad \varphi_{YA} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{Z}{c}; \quad \varphi_{XB} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{Z}{c}.$$

Из рис. 3.30 следует, что

$$(D/2 - d/2)^2 + L_0^2 = L^2; \quad (D/2 + d/2)^2 + L_0^2 = Z^2.$$

Откуда

$$(Z - L)(Z + L) = Dd, \quad Z + L \approx 2L.$$

Таким образом, имеем для величины разности фаз:

$$\Delta\varphi = \varphi_{XA} + \varphi_{YB} - \varphi_{XB} - \varphi_{YA} = \frac{E}{c\hbar} \cdot \frac{Dd}{L}.$$

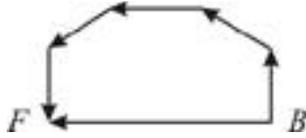
Полученное соотношение показывает, что небольшое изменение расстояния между детекторами вызывает значительное изменение фазового множителя, при этом угловое разрешение метода для видимой области спектра равно ($\Delta\varphi = \pi$)

$$\frac{D}{L} = \frac{\pi c \hbar}{Ed} = \frac{5 \cdot 10^{-7}}{d} \text{ рад.}$$

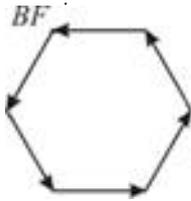
Рассмотренный эффект Х–Б–Т фактически есть интерференция света и радиоволн.

3.9.3. Дифракция света

Пусть фотон падает на щель BF такой ширины b (рис. 3.31), что за щелью у фотона есть возможность пойти по одной из множества траекторий к детектору A . Чтобы учесть эффект от сложения вероятностей при прохождении фотона по всем траекториям, за щелью установлена собирающая линза MN , которая не вносит дополнительной разности хода при прохождении фотона от щели к детектору (фокусу), но суммирует вероятности прохождения фотонов от щели BF к детектору A по всем возможным траекториям. Из рис. 3.31 следует, что если за счет прохождения фотона по различным ломаным траекториям 1–6 набегает поворот фазы, равный π , то в детекторе A будет максимальный сигнал, если 2π – то минимальный.



Результирующая сложения амплитуд вероятностей равна \overline{BF} при угле наблюдения φ_1



Результирующая сложения амплитуд вероятностей \overline{BF} равна 0, при угле наблюдения $\varphi_2 > \varphi_1$

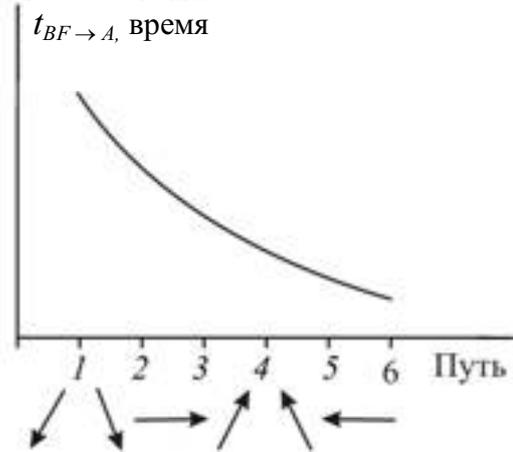
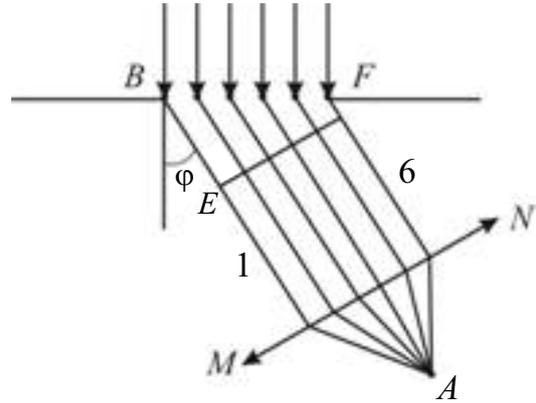


Рис. 3.31. Дифракция фотона на щели шириной BF ; MN – собирающая линза. На графике изображено время прохождения фотона по различным путям к детектору A . Сбоку – результаты сложения амплитуд вероятностей

В общем случае мы можем разбить щель на m различных участков шириной b/m , при прохождении по траектории k расстояние от BF до EF равно $D_k = k(b/m)\sin\varphi$, где $0 \leq k \leq (m - 1)$. Соответственно, показатель экспоненты в суммировании амплитуд вероятностей равен

$$\varphi_k = \frac{E}{\hbar} t_k = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{\Delta_k}{c} = \frac{E}{\hbar} \cdot \frac{kb}{cm} \sin\varphi.$$

Полная вероятность события – попадания фотона в детектор A при прохождении по всем траекториям от щели BF равна

$$\begin{aligned} P &= \left| \sum_{k=0}^{m-1} \psi \exp\left(-i \frac{E kb \sin\varphi}{\hbar cm}\right) \right|^2 = \\ &= |\psi|^2 \cdot \left| 1 + \exp\left(-i \frac{E b \sin\varphi}{\hbar cm}\right) + \exp\left(-i \frac{E 2b \sin\varphi}{\hbar cm}\right) + \dots \right|^2 = \\ &= |\psi|^2 \left| \frac{e^{i \frac{m E b \sin\varphi}{2\hbar cm}} - e^{-i \frac{m E b \sin\varphi}{2\hbar cm}}}{e^{i \frac{E b \sin\varphi}{2\hbar cm}} - e^{-i \frac{E b \sin\varphi}{2\hbar cm}}} \right|^2 = |\psi|^2 \cdot \frac{\sin^2 \frac{m E b \sin\varphi}{2\hbar cm}}{\sin^2 \frac{E b \sin\varphi}{2\hbar cm}}. \end{aligned}$$

При $\varphi \rightarrow 0$ имеем

$$P_0 = m^2 |\psi|^2.$$

Вероятность попадания фотона по m -траекториям в детектор при наличии фокусирующей линзы в m^2 раз больше, чем от одной траектории.

Полная вероятность обнаружить фотон в A может быть переписана, таким образом, в виде

$$P = P_0 \frac{\sin^2 \frac{Eb \sin \varphi}{2\hbar c}}{m^2 \sin^2 \frac{Eb \sin \varphi}{2\hbar cm}}.$$

Положения максимумов у этой функции, если m велико, можно приближённо определить из условия:

$$\frac{Eb \sin \varphi}{2\hbar c} = \frac{\pi}{2} + n\pi, \text{ где } n = 1, 2, 3\dots$$

или

$$b \sin \varphi = \left(\frac{\pi}{2} + n\pi \right) \frac{2\hbar c}{E} = (\pi + 2\pi n) \frac{\hbar c}{E} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{hc}{E}.$$

Положения минимумов определяются точно:

$$\frac{Eb \sin \varphi}{2\hbar c} = n\pi$$

или

$$b \sin \varphi = 2\pi \hbar \frac{nc}{E} = n \frac{hc}{E}.$$

Интенсивность максимума n равна

$$P = P_0 \left(\frac{\pi}{2} + n\pi \right)^{-2}.$$

Дифракция света является квантовым эффектом, поскольку если перейти к классическому пределу $\hbar \rightarrow 0$, то никаких дифракционных картин, связанных с появлением побочных максимумов, наблюдаться не будет.

Дифракция имеет место и для одного фотона. Вклад в появление фотона в точке A дают всевозможные траектории его движения. Если за линзой MN поставить фотопластинку и долго пускать на щель BF по одному фотону, то в итоге получится типичное для дифракционной картины чередующееся распределение сгущений и разрежений точек — мест попадания фотонов в фотопластинку.

Это ещё раз доказывает корпускулярную природу света. Фотон — квантовый объект и ведёт себя в соответствии с законами квантовой электродинамики. Проявление дифракционных и интерференционных

свойств при прохождении единичных квантов через дифракционные и интерференционные устройства позволяет по-новому взглянуть на проблему когерентности. Интерференционные (дифракционные) явления не проявляются, если мы в состоянии определить траекторию движения квантового объекта или существенно сужаем континуум этих траекторий в пространственном или временном аспектах. По существу интерферируют не фотоны, а возможные траектории движения одного фотона.

Приведённые примеры показывают, как квантовая электродинамика воспроизводит явление, хорошо известное из опыта: отражение света, прямолинейность распространения, фокусировка света линзой. Она также хорошо описывает и другие явления: интерференция и дифракция света. Квантовая теория успешно объясняет все световые явления, исходя из тех положений, что свет — это квантовый объект, частица, подчиняющаяся законам квантовой теории, имеющим статистический характер.

3.10. Квантовый компьютер

Основой современного цифрового компьютера является совокупность макроскопических полупроводниковых базисных элементов — классических битов с двумя возможными логическими булевыми состояниями «0» и «1» и логических элементов — вентилях, которые производят локальные логические операции над состояниями этих элементов для того, чтобы получить в результате определённое конечное состояние на выходе.

Логические состояния в каждом бите — это, например, два значения тока в определённом проводнике или потенциала на нём, рассматриваемые как макроскопические некогерентные классические величины. Современные цифровые компьютеры, несмотря на исходную квантовую природу физических процессов, происходящих в полупроводниковых элементах, рассматриваются как классические. Вычисление в компьютере представляет процесс, в ходе которого происходят определённые для каждой логической операции нелинейные взаимодействия потоков информации друг с другом и их преобразование. Соответствующие процессы происходят на физическом уровне и с носителями информации — некогерентными сигналами, т. е. с токами и напряжениями.

Квантовые вычисления. Любая классическая двухуровневая система, как и квантовая, имеет основное $|0\rangle$ и неосновное $|1\rangle$ базисные состояния. Примером классической двухуровневой системы является из-

вестный в микроэлектронике инвертор, осуществляющий операцию «НЕ». В зависимости от того, заняты ли эти состояния с вероятностями $P(0) = 1, P(1) = 0$ или $P(0) = 0, P(1) = 1$, мы имеем булевы логические состояния «0» или «1».

В случае когда действуют законы квантовой физики, возникает намного более богатая ситуация. Волновая функция квантовых состояний двухуровневой системы – квантового бита, получившего в дальнейшем название кубита (*quantum bit* или *qubit*), может представлять собой суперпозицию базисных состояний (вектор состояния) следующего вида: $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$, где α, β – комплексные амплитуды состояний, при этом $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$. Помимо вероятностей $P(0) = |\alpha|^2$ и $P(1) = |\beta|^2$ заполнения базисных состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$, состояние кубита характеризуется когерентными или интерференционными слагаемыми в вероятности состояния $|\psi\rangle$, определяемых произведениями комплексных амплитуд $\alpha\beta^*$ и $\alpha^*\beta$. Состояние квантового бита в отличие от классического может изменяться не только путем изменения вероятностей $P(0)$ и $P(1)$, но и более тонко путем изменения амплитуд состояний α и β , что соответствует поворотам вектора состояния $|\psi\rangle$ в, так называемом, гильбертовом двухмерном пространстве состояний. В этом и состоит принципиальное различие классического и квантового бита.

Кардинально новой оказалась идея о квантовых вычислениях, которая впервые высказана советским математиком Ю.И. Маниным в 1980 г. и стала активно обсуждаться после опубликования в 1982 г. статьи Р. Фейнмана. Фейнман обратил внимание на способность изолированной квантовой системы из L двухуровневых квантовых элементов находиться в когерентной суперпозиции из 2^L булевых состояний, характеризующейся 2^L комплексными числами и увеличенной до 2^L размерностью соответствующего гильбертова пространства. Для описания такого квантового состояния в классическом вычислительном устройстве потребовалось бы задать 2^L комплексных чисел, т. е. понадобились бы экспоненциально большие вычислительные ресурсы. Отсюда был сделан обратный вывод о том, что эффективное численное моделирование квантовых систем, содержащих до сотни двухуровневых элементов, практически недоступно классическим компьютерам, но может эффективно осуществляться путем выполнения логических операций на квантовых системах, которые действуют на суперпозиции многих квантовых состояний.

Поскольку законы квантовой физики на микроскопическом уровне являются линейными и обратимыми, то и соответствующие кванто-

вые логические устройства, производящие операции с когерентными (чистыми) квантовыми состояниями отдельных кубитов, оказываются также логически и термодинамически обратимыми, а квантовые вычислительные операции представляются унитарными операторами (или матрицами $2^L \times 2^L$) в 2^L -мерном гильбертовом пространстве. Квантовые вентили аналогичны соответствующим обратимым классическим вентилям, однако они способны совершать унитарные операции над суперпозициями состояний. Выполнение унитарных логических операций над кубитами предполагается осуществлять с помощью соответствующих внешних воздействий, которыми управляют классические компьютеры.

Ускорение квантовых вычислений. Элементарным шагом при квантовых вычислениях является унитарная операция над L -кубитовой суперпозицией состояний регистра из L кубитов, при этом выполняется параллельная обработка сразу всех 2^L комплексных амплитуд, тогда как для классического компьютера подобная операция потребовала бы 2^L отдельных элементарных шагов. Такое свойство называется квантовым параллелизмом. В работе квантовых устройств оно приводит к экспоненциальному ускорению вычислительного процесса. В этом заключается одно из главных преимуществ квантовых компьютеров по сравнению с классическими цифровыми компьютерами. Вычислительный процесс носит характер интерференции — комплексные амплитуды состояний многих кубитов могут складываться конструктивно и деструктивно.

Одним из наиболее интересных свойств квантовых состояний, принципиально отличающих их от классических, является запутывание (*entanglement*) состояний, которое представляет собой когерентную суперпозицию состояний нескольких квантовых элементов, определяющее своеобразную нелокальную корреляцию этих состояний, возникающую при взаимодействии кубитов. Такие состояния получили название запутанных (*entangled*) состояний. Запутанные состояния играют очень важную роль в различных процессах передачи и обработки квантовой информации. Понятие запутывания (*entanglement*) было введено Э. Шрёдингером под названием *Verschränkung* в 1935 г., большое внимание оно привлекло к себе с 1993 г. в связи с обнаруженной Ч. Беннеттом теоретической возможностью использования его для передачи («телепортации») неизвестного для отправителя A квантового состояния двухуровневой системы к получателю B без реального перемещения самого элемента. Эта мысль стала далее основ-

ной для развития принципиально нового метода секретной передачи информации (криптографии). В последнее время квантовое явление «телепортации» активно обсуждается с точки зрения организации быстрых квантовых вычислений в многокубитовых системах.

Перечень возможных приложений запутанного состояния уже достаточно велик. Свойство запутывания квантовых состояний лежит и в основе многих квантовых алгоритмов. Оно является одной из основ ожидаемых успехов квантовых вычислительных процессов, поскольку открывает принципиально новые возможности кодирования информации, обеспечения помехозащищенности и более эффективного управления информацией.

С ожидаемым экспоненциальным ускорением квантовых вычислений обычно связывают перспективы решения, так называемой, NP-полной (*Nondeterministic polynomial-time complete*) проблемы, то есть проблемы решения таких задач, для которых это решение очень трудно найти с помощью классических цифровых компьютеров, хотя очень просто это решение проверить. Такие задачи относятся к классу невычисляемых в том смысле, что они не могут быть решены на классических компьютерах за время, полиномиально зависящее от числа битов L , представляющих задачу.

Квантовый алгоритм факторизации, предложенный П. Шором в 1994 г., позволяющий производить разложение n -значного числа на простые множители за время, полиномиально зависящее от n , т. е. с экспоненциальным ускорением по сравнению с самыми мощными классическими алгоритмами, стал одним из основных побуждений для интенсивного развития квантовых методов вычислений и изобретения алгоритмов, которые позволяют решать некоторые NP-проблемы. Считается, что алгоритм Шора уже сейчас позволит найти применение квантовым компьютерам весьма скромных размеров (десятки кубитов) для целей квантовой криптографии, квантовой коммуникации.

Одним из важных приложений квантовых вычислений, возможно, окажется также моделирование поведения широкого класса многочастичных квантовых систем.

Структура квантового компьютера. Квантовые методы выполнения вычислительных операций, а также передачи и обработки информации уже начинают воплощаться в реально функционирующих экспериментальных устройствах, что стимулирует усилия по реализации квантовых компьютеров — этого нового направления в вычислительной технике.

Принципиальная схема работы любого квантового компьютера может быть представлена следующим образом (рис. 3.32). Основной его частью является квантовый регистр – совокупность некоторого числа L кубитов. До ввода информации в компьютер все кубиты регистра должны быть приведены в основные базисные (булевы) состояния, т. е. в состояние $|0_1\rangle, |0_2\rangle, |0_3\rangle, \dots, |0_L\rangle \equiv |0_1, 0_2, 0_3, \dots, 0_L\rangle$. Эта операция называется подготовкой начального состояния, или инициализацией (*initializing*). Далее каждый кубит подвергается селективному воздействию, например, с помощью импульсов внешнего электромагнитного поля, управляемых классическим компьютером, которое переведёт основные базисные состояния определённых кубитов в неосновные состояния $|0\rangle \Rightarrow |1\rangle$.



Рис. 3.32. Схематическая структура квантового компьютера

При этом состояние всего регистра перейдёт в суперпозицию базисных состояний вида $|n\rangle = |n_1, n_2, n_3 \dots n_L\rangle$, где $n_i = 0, 1$, задающую бинарное представление числа $n = \sum_{i=1}^L n_i 2^i$.

При вводе информации в квантовый компьютер состояние входного регистра, с помощью соответствующих импульсных воздействий, преобразуется в когерентную суперпозицию базисных ортогональных состояний:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{2^L-1} c_n |n\rangle.$$

В таком виде информация далее подвергается воздействию квантового процессора, выполняющего последовательность квантовых логических операций, определяемую унитарным преобразованием, действующим на состояние всего регистра. К моменту времени t в результате преобразований исходное квантовое состояние становится новой суперпозицией вида

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{2^L-1} c_n \hat{U}_{nm} |n\rangle,$$

которая и определяет результат преобразования информации на выходе компьютера.

Совокупность всех возможных операций на входе данного компьютера, формирующих исходные состояния, а также осуществляющих унитарные локальные преобразования, соответствующие алгоритму вычисления, способы подавления потери когерентности, — так называемой, декогерентизации (*decoherence*) квантовых состояний и исправления случайных ошибок — играют здесь ту же роль, что и «программное обеспечение» (*software*) в классическом компьютере.

Общие требования к элементной базе квантового компьютера. При выборе конкретной схемы любого квантового компьютера необходимо решить три вопроса: во-первых, выбрать физическую систему, представляющую требуемую систему кубитов; во-вторых, определить физический механизм, определяющий взаимодействие между кубитами, необходимое для выполнения двухкубитовых операций; в-третьих, определить способы селективного управления кубитами и измерения их состояния на выходе. Все это вместе взятое аналогично «аппаратному обеспечению» (*hardware*) классического компьютера.

Считается, что для реализации полномасштабного квантового компьютера, превосходящего по производительности любой классический компьютер, на каких бы физических принципах он не работал, следует обеспечить выполнение следующих пяти основных требований:

- 1) физическая система, представляющая полномасштабный квантовый компьютер, должна содержать достаточно большое число $L > 10^3$ хорошо различаемых кубитов для выполнения соответствующих квантовых операций;
- 2) приготовления входного регистра в исходном основном базисном состоянии $|0_1, 0_2, 0_3 \dots 0_L\rangle$, т. е. возможность процесса инициализации;
- 3) максимальное подавление эффектов декогерентизации квантовых состояний, обусловленное взаимодействием системы кубитов с окружающей средой, что приводит к разрушению суперпозиций квантовых состояний и может сделать невозможным выполнение квантовых алгоритмов. Время декогерентизации должно, по крайней мере, в 10^4 раз превышать время выполнения основных квантовых операций (времени такта). Для этого система кубитов должна быть достаточно слабо связана с окружением.

- 4) Выполнение требуемой совокупности квантовых логических операций, определяющей унитарное преобразование $\hat{U}(t)$ за время такта. Эта совокупность должна содержать определённый набор только двухкубитовых операций типа контролируемый инвертор или контролируемое «НЕ» (*Controlled NOT* \equiv *CNOT*) (аналог исключающего «ИЛИ» в классических компьютерах), осуществляющих операции поворота вектора состояния двух взаимодействующих кубитов в четырехмерном гильбертовом пространстве, и однокубитовых операций, осуществляющих поворот вектора состояния кубита в двумерном гильбертовом пространстве, таких как операции «НЕ», Адамара и некоторые другие.
- 5) Высокая надежность измерения состояния квантовой системы на выходе. Проблема измерения конечного квантового состояния является одной из основных проблем квантовых вычислений.

Основные направления в развитии элементной базы квантового компьютера. В настоящее время наиболее широко обсуждаются следующие основные направления в развитии элементной базы будущих квантовых компьютеров:

1. Использование для модельной реализации квантовых компьютеров в качестве кубитов уровней энергии ионов, захваченных ионными ловушками, создаваемыми в вакууме определённой конфигурацией электрического поля в условиях лазерного охлаждения их до микрокельвиновых температур. Взаимодействие между заряженными ионами в одномерной цепочке этих ловушек осуществляется посредством возбуждения их коллективного движения, а индивидуальное управление ими – с помощью лазеров инфракрасного диапазона. Преимущество такого подхода состоит в сравнительно простом индивидуальном управлении отдельными кубитами. Основными недостатками этого типа квантовых компьютеров являются необходимость создания сверхнизких температур, обеспечение устойчивости состояний ионов в цепочке и ограниченность возможного числа кубитов значением $L < 40$.
2. Использование в качестве кубитов атомов с ядерными спинами с $I = 1/2$, принадлежащих молекулам органических жидкостей с косвенным скалярным взаимодействием между ними, и методов ядерного магнитного резонанса (ЯМР) для управления кубитами.

Были выполнены первые эксперименты на ядерных спинах двух атомов водорода ^1H в молекулах 2,3-дибромотиофена $\text{SCH}:(\text{CBr})_2:\text{CH}$ и

на трёх ядерных спинах — одном в атоме водорода ^1H и двух в изотопах углерода ^{13}C в молекулах трихлорэтилена $\text{CCl}_2\text{:CHCl}$. Важным здесь является то, что для селективного воздействия на ядерные спины молекулы необходимо, чтобы они различались по резонансным частотам. Позднее были осуществлены квантовые операции также в цитозине, хлороформе, аланине и других жидкостях с числом спинов-кубитов $L = 3, 5, 6, 7$.

Главным преимуществом такого компьютера является то, что огромное число практически независимых молекул-компьютеров жидкости действует, обеспечивая тем самым возможность управления ими с помощью хорошо известных в технике ядерного магнитного резонанса (ЯМР) операций над макроскопическим объёмом жидкости. Последовательности радиочастотных импульсов, выполняющие в этом случае роль определённых квантовых логических вентилях, осуществляют глобальные унитарные преобразования состояний соответствующих ядерных спинов для всех молекул-компьютеров. Индивидуальное обращение к отдельным кубитам заменяется одновременным обращением к соответствующим кубитам во всех молекулах большого ансамбля. Компьютер такого рода получил название ансамблевого (*bulk-ensemble quantum computer*) ЯМР квантового компьютера. Замечательно, что он может в принципе работать при комнатной температуре. Время декогерентизации квантовых состояний ядерных спинов в жидкости достаточно велико. Оно может составлять несколько секунд.

В области ЯМР квантовых компьютеров на органических жидкостях к настоящему времени достигнуты наибольшие успехи. Они связаны в основном с хорошо развитой импульсной техникой ЯМР-спектроскопии, обеспечивающей выполнение различных операций над когерентными суперпозициями состояний ядерных спинов, и с возможностью использования для этого стандартных ЯМР-спектрометров, работающих при комнатных температурах.

Экспериментально на ЯМР квантовых компьютерах были осуществлены алгоритм Гровера поиска данных, квантовое преобразование Фурье, квантовая коррекция ошибок, квантовая телепортация, квантовое моделирование и другие операции.

ЯМР квантовые компьютеры на молекулах органической жидкости не смогут иметь число кубитов, значительно больше десяти. Их следует рассматривать лишь как прототипы будущих квантовых компьютеров, полезные для отработки принципов квантовых вычислений и проверки квантовых алгоритмов.

3. Использование в качестве кубитов зарядовых состояний куперовских пар в квантовых точках, связанных переходами Джозефсона^{*)}. Перспективность этого направления состоит в возможности создания электронных квантовых устройств высокой степени интеграции на одном кристалле, при этом для управления кубитами не потребуются громоздкие лазерные или ЯМР-установки. Однако остаются нерешёнными ряд важных проблем устойчивости состояний кубитов и декогерентизация.
4. Важные перспективы открываются перед направлением твёрдых ЯМР квантовых компьютеров. Было предложено использовать в качестве кубитов обладающие ядерным спином $1/2$ донорные атомы с изотопами ^{31}P , которые имплантируются в кремниевую структуру. Это предложение, которое пока остаётся нереализованным, открывает потенциальную возможность создания квантовых вычислительных устройств с практически неограниченным числом кубитов.

Предполагается использовать достаточно низкие температуры для того, чтобы электроны донорных атомов занимали только нижнее спиновое состояние в магнитном поле. В полях $B \geq 2$ Тл это соответствует температурам $T \leq 0,1$ К, гораздо более низким, чем температура вымораживания электронных состояний доноров, которые будут поэтому оставаться в неионизированном основном орбитальном S -состоянии.

Каждый донорный атом с ядерным спином — кубит в полупроводниковой структуре предполагается расположить регулярным образом с достаточной точностью под «своим» управляющим металлическим затвором (затвор A), отделённым от поверхности кремния тонким диэлектриком (например, окисью кремния толщиной порядка нескольких нанометров). Эти затворы образуют линейную решетку произвольной длины с периодом l (рис. 3.33).

С помощью электрического поля, создаваемого потенциалом затворов A , можно изменять распределение электронной плотности вблизи ядра в основном состоянии, изменяя, соответственно, резонансную частоту каждого ядерного спина, которая определяется сверхтон-

^{*)} Эффект Джозефсона — протекание сверхпроводящего тока через тонкий (~ 10 Å) слой диэлектрика, разделяющий два сверхпроводника. На его основе создан сверхпроводящий квантовый интерферометр, с помощью которого уточнены значения ряда фундаментальных физических постоянных, в частности, постоянной Планка. Эффект Джозефсона используется в криогенных приборах, а также в качестве быстродействующих логических элементов ЭВМ.

ким взаимодействием его с электронным спином. Это позволяет осуществлять индивидуальное управление квантовыми операциями путём селективного воздействия резонансных радиочастотных импульсов на ядерные спины определённых доноров.

Величиной косвенного взаимодействия между ядерными спинами соседних доноров, которое обеспечивает выполнение двухкубитовых операций, предлагается управлять с помощью затворов J , расположенных между затворами A . Это возможно, если характерные размеры полупроводниковой структуры лежат в нанометровой области. Для формирования таких структур предполагается воспользоваться приёмами современной нанотехнологии, в частности методами эпитаксиального выращивания, сканирующей зондовой нанолитографии в сверхвысоком вакууме на основе сканирующих туннельных и атомных силовых микроскопов, электронно-лучевой и рентгеновской литографией.

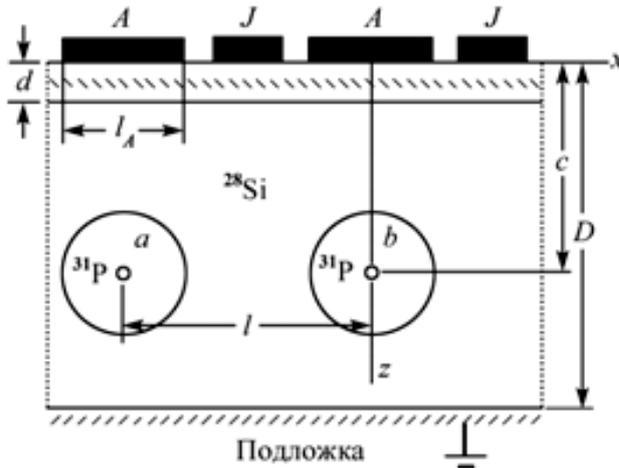


Рис. 3.33. Схематическое изображение двух ячеек полупроводниковой структуры модели Кейна; $l_A \sim 10$ нм, $l \sim 20$ нм, $c \sim 20$ нм

Чтобы исключить взаимодействие ядерных спинов доноров с окружением, кремний и окисел кремния должны быть достаточно хорошо очищены от изотопа ^{29}Si , обладающего спином $I = 1/2$, который содержится в количестве 4,7 % в естественном кремнии. Возможно использование и других материалов.

- Использование в качестве состояний кубитов двух спиновых или двух зарядовых электронных состояний в полупроводниковых наноструктурах, в частности, в квантовых точках, формируемых в гетероструктурах типа AlGaAs/GaAs либо со спин-спиновым обменным, либо с электрическим взаимодействием между кубитами. Индивидуальное управление кубитами в случае спиновых электронных состояний предполагается осуществлять, используя, так называемые, спиновые клапаны, а для измерения состояния отдельного спина – спиновые фильтры из ферро-

магнитных туннельных барьеров. В случае зарядовых состояний предполагается управлять кубитами либо лазерами инфракрасного диапазона, либо с помощью электрического воздействия на высоту барьера, разделяющего кубиты.

6. Квантовый регистр из нейтральных атомов. Полагают, что одним из наиболее перспективных кандидатов на роль кубитов являются нейтральные атомы, и уже достигнуты успехи в работе с отдельными атомами в оптической ловушке.

В качестве источника атомов используются охлажденные в магнитооптической ловушке до сверхнизких температур атомные пары цезия (количество атомов в ловушке контролируется по интенсивности флуоресценции). Из магнитооптической ловушки атомы цезия загружались в дипольную оптическую ловушку (рис. 3.34), созданную двумя расходящимися в противоположных направлениях лучами лазера с длиной волны 1064 нм (глубина потенциальной ямы для атомов составляла примерно 2 мК).

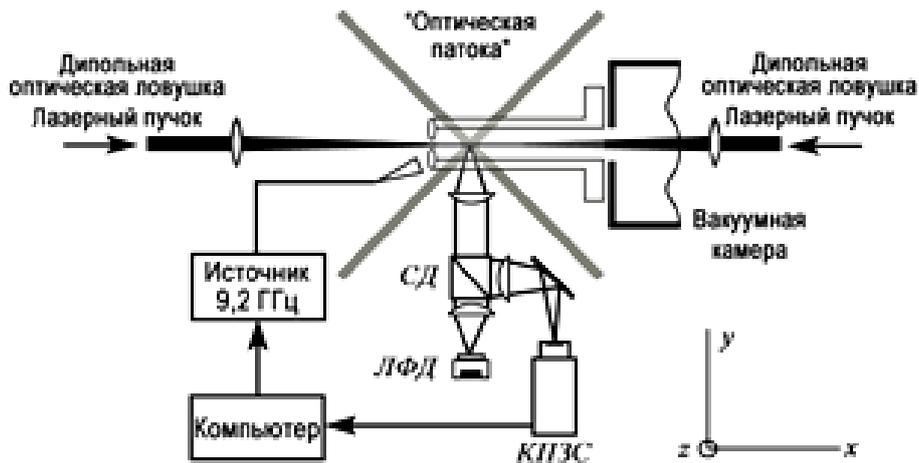


Рис. 3.34. Схема экспериментальной установки (СД – светодиод; КИЗС – камера на основе ПЗС-матрицы с повышенной чувствительностью; ЛФД – лавинный фотодиод)

Атомы в оптической ловушке освещались светом, частота которого чуть ниже частоты поглощения атомов цезия. Этот свет нужен для доплеровского охлаждения атомов. За счёт эффекта Доплера движущийся навстречу лучу света атом способен поглотить фотон, соответственно, получив от кванта импульс в направлении, противоположном направлению движения. Через какое-то время возбужденный атом излучает фотон (в среднем излучение происходит изотропно по всем направлениям); если атомы освещаются со всех сторон, то в результате многократных актов поглощения–излучения фотонов атом постепенно тор-

мозится. С помощью оптической системы, содержащей камеру на основе ПЗС-матрицы с повышенной чувствительностью, регистрируются излучаемые атомами фотоны и, таким образом, определяется число атомов, находящихся в оптической ловушке и их положение в пространстве (с точностью около 3 мкм). ПЗС – прибор с зарядовой связью.

После того как атомы цезия загрузились в оптическую ловушку, один из лазеров выключается, давая атомам возможность мигрировать вдоль лазерного луча, а затем вновь включается, останавливая атомы. В результате удаётся получить точно определённое число атомов, вытянутых в цепочку вдоль лазерного луча. В качестве базисных состояний кубита выбирались два различных уровня сверхтонкого расщепления основного состояния атома цезия $6S_{1/2}$:

$$|F = 4, m_F = 4 \rangle (|0\rangle) \text{ и } |F = 3, m_F = 3 \rangle (|1\rangle)$$

Расстояние между такими уровнями очень мало (обычно величина сверхтонкого расщепления составляет несколько гигагерц).

Атомы находились в области неоднородного магнитного поля, за счёт чего достигался небольшой сдвиг частот спектральных переходов (по причине эффекта Зеемана). Это даёт возможность, соответствующим образом меняя частоту микроволнового излучения, воздействовать на состояние избранного атома (осуществлять селективную адресацию): данные о положении атомов с камеры поступали на управляющий компьютер. Компьютер производил вычисление резонансной частоты для каждого конкретного атома и в случае необходимости воздействия на состояние определённого атома, выдавал команды на генератор микроволнового излучения, который посылал импульсы микроволнового излучения требуемой длительности и частоты.

На рис. 3.35 показан пример осуществления работы с квантовым регистром из пяти нейтральных атомов (рис. 3.35, *a*). В начальный момент, за счёт воздействия циркулярно-поляризованным лазерным излучением, все атомы были приведены в состояние $|0\rangle$ (т. е. регистр был приведён в состояние $|00000\rangle$) – рис. 3.35, *b*. После этого атомы 2 и 4 путём воздействия микроволновых импульсов соответствующей частоты и длительности приводились в состояние $|1\rangle$ (регистр был приведён в состояние $|01010\rangle$) – рис. 3.35, *c*. С целью проверки того, действительно ли регистр находится в том состоянии, в котором он должен находиться по предположению исследователей, магнитное поле выключалось и, с помощью лазерного излучения точно подобранной частоты, атомы, находящиеся в состоянии $|0\rangle$, «выдавливались» из ловушки (подобное селективное воздействие позволяет точно определить состояние атома с ве-

роятностью более 99 %) – рис. 3.35, *d*. По завершении манипуляций камера зафиксировала, что в ловушке осталось только два атома (2 и 4), которые должны были остаться. Как показывают эксперименты, минимальное расстояние между атомами, позволяющее осуществлять выборочную адресацию, составляет примерно 2,5 мкм (атом, находящийся в 2,5 мкм от атома, на состояние которого происходит воздействие, с вероятностью около 100 % не изменяет своего состояния).

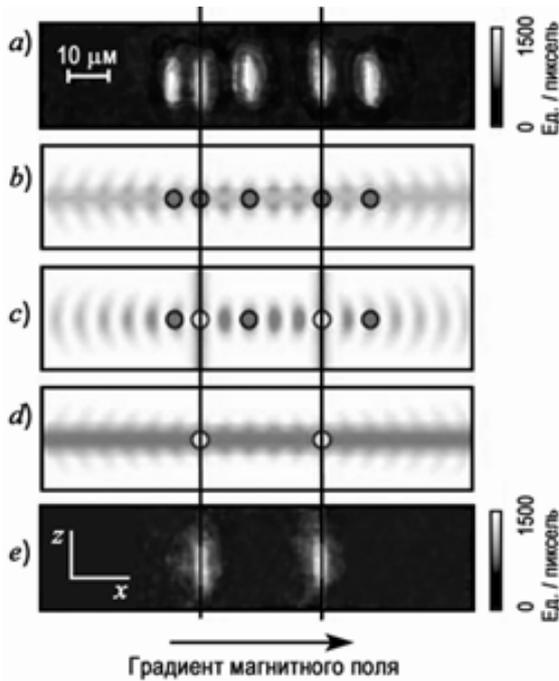


Рис. 3.35. Работа с квантовым регистром из пяти нейтральных атомов: а, е – полученные с помощью камеры изображения атомов (время выдержки – 500 мс); б, с, d – манипуляции с атомами (подробности в тексте), тёмным показаны атомы в состоянии $|0\rangle$, светлым – в состоянии $|1\rangle$

Проблемой является организация взаимодействия между атомами-кубитами, которое позволило бы осуществлять квантовые логические операции. Наиболее привлекательными с точки зрения создания суперкомпьютеров в настоящее время представляются три пока нереализованных конкурирующих направления: полупроводниковые ЯМР квантовые компьютеры, квантовые компьютеры на переходах Джозефсона и квантовые компьютеры на квантовых точках. Все они допускают произвольно большое число кубитов, и для них существуют уже многие наработанные приёмы микро- и нанотехнологии создания полупроводниковых и сверхпроводниковых интегральных схем.

Все три направления предполагают наличие генераторов управляющих импульсов, использование низких температур и, следовательно, применение совсем не миниатюрных обслуживающих систему кубитов устройств, а в случае твёрдотельного ЯМР квантового компьютера ещё и использование магнита.

Однако для твёрдотельного ЯМР квантового компьютера можно указать на ряд важных преимуществ:

1. Ядерные спины сами по себе являются кубитами.
2. При низких температурах они характеризуются очень большими временами релаксации (и, соответственно, временами декогерентизации) по сравнению с электронными спинами.

Технологические структуры нанометрового масштаба в полупроводниковых ЯМР квантовых компьютерах предназначаются не для создания самих кубитов, как в случае сверхпроводниковых устройств, а лишь для задач управления кубитами и их измерения. Можно ожидать, что в ближайшие годы уже будут созданы простейшие фрагменты или прототипы ЯМР компьютера. Создание многокубитовых твёрдотельных структур — более далёкая перспектива. Она потребует привлечения многих технологических и схемотехнических достижений современной микро- и наноэлектроники, а также разработки программ математического моделирования физических процессов, в частности процессов декогерентизации, в многокубитовых квантовых системах.

Нерешённые проблемы. В настоящее время отсутствует практическая разработка методов квантовых измерений состояний отдельного ядерного спина или их малых групп, не изучено влияние неидеальности управляющих кубитами импульсных последовательностей и многоуровневой сверхтонкой структуры энергетического спектра на декогерентизацию квантовых состояний, не разработаны способы подавления декогерентизации, определяемой шумами в электронной измерительной системе, не опробованы квантовые методы коррекции ошибок для многокубитовых систем.

Можно ожидать, что в будущем появятся также комбинированные варианты твёрдотельных квантовых компьютеров, использующих, например, в одной структуре и ядерные спины, и квантовые точки с электронными спинами, а также комбинированные методы обращения к кубитам, такие как двойной электрон — ядерный магнитный резонанс, динамическая поляризация ядерных спинов и оптическое детектирование ядерного магнитного резонанса.

Появление квантовых компьютеров будет означать революцию не только в вычислительной технике, но также и в технике передачи информации, в организации принципиально новых систем связи типа квантового Интернета и может быть началом развития новых пока неизвестных областей науки и техники.

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

Волновая функция свободной частицы, импульс которой в точности равен p_0 , имеет вид $\psi(x, t) = A \exp [i(k_0 x - \omega t)]$, где $k_0 = p_0/\hbar$. Если частица локализована в пространстве, причём её локализация не точечная, а описывается распределением Гаусса, то

$$\psi(x, 0) = \exp\left(-\frac{x^2}{4\sigma_x^2}\right) \cdot \exp(ik_0 x).$$

Соответствующее распределение по импульсам

$$B(k) = (\sigma_x / \sqrt{\pi}) \exp[-\sigma_x^2(k - k_0)^2],$$

причём $\psi(x, 0) = \int B(k) e^{ikx} dk$.

Среднеквадратичное отклонение распределения по координатам равно σ_x , а распределения по импульсам $\sigma_p = \hbar/(2\sigma_x)$. Для любого волнового пакета $\sigma_p \sigma_x \geq \hbar/2$ (принцип неопределённости).

Групповая скорость любого волнового пакета в квантовой механике совпадает с классической скоростью частицы:

$$v_g = d\omega/dk = p/m = v.$$

Частице, заключённой в ящике длиной L , соответствуют стоячие волны только с $\lambda_n = 2L/n$. Кинетические энергии частицы квантованы:

$$K_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

В случае «ямы» переменной глубины $U = U(x)$ волновая функция удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2}[E - U(x)]\psi.$$

Граничному условию $\psi \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$ удовлетворяют лишь определённые собственные функции $\psi_n(x)$ и собственные значения E_n .

В случае прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины волновая функция имеет вид $\psi_1 = A \cos(k_1 x + \varphi)$ внутри ямы и $\psi_2 = B e^{-k_2 x} + C e^{k_2 x}$ вне её, где $k_1 = \sqrt{2mE/\hbar^2}$, $k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)/\hbar^2}$.

Сшивая волновые функции и их производные ($\psi_1 = \psi_2$; $d\psi_1/dx = d\psi_2/dx$) на границе ямы, мы получаем условия на допустимые значения E .

Если $U(x) = m\omega_{\text{кл}}^2 x^2/2$ представляет собой потенциальную энергию гармонического осциллятора, то собственные значения энергии записывают в виде

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_{\text{кл}}, \text{ где } n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

Первые две собственные функции имеют вид

$$\psi_0(x) = \exp\left[-\frac{m\omega_{\text{кл}}}{2\hbar}x^2\right]$$

и

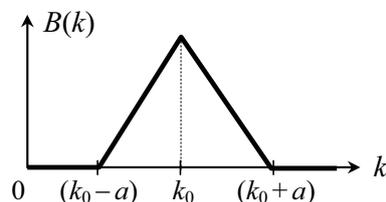
$$\psi_1(x) = x \exp\left[-\frac{m\omega_{\text{кл}}}{2\hbar}x^2\right].$$

Упражнения

1. Если $\psi = \exp[i(kx - \omega t)] + \exp[i(kx + \omega t)]$, то чему равно $\psi^* \psi$?
2. Вычислите $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-x^2/2\sigma^2) dx$.
3. Пусть $\psi = \exp[i(k_0 + \Delta k)x] + \exp[i(k_0 - \Delta k)x]$.
 - а) Чему равно $\psi^* \psi$?
 - б) Если Δx — полуширина центрального волнового пакета на уровне половины максимальной высоты, то чему равно произведение $\Delta x \Delta p$, где $\Delta p = \hbar \Delta k$?
4. Если $E = \hbar\omega = mc^2 + p^2/(2m)$, то каковы фазовая и групповая скорости соответствующего волнового пакета (ответ запишите через c и классическую скорость v)?
5. При $t = 0$ размер волнового пакета электрона $\Delta x_0 = 1$ мкм. Каким будет его размер при $t = 1$ с?
6. Размер Δx_0 волнового пакета электрона таков, что спустя каждую секунду он увеличивается на Δx_0 . Найдите Δx_0 .
7. Электрон заключён в одномерный ящик длиной $L = 4 \cdot 10^{-10}$ м.
 - а) Чему равна энергия E_2 (в эВ)?
 - б) Найдите длину волны фотона, испускаемого при переходе $E_4 \rightarrow E_2$.
8. Если в примере к рис. 3.10, a положить $U_1 = -20$ эВ, а $x_0 = 5 \cdot 10^{-11}$ м, то каковы при этом будут значения E_1 и K_1 для электрона?
9. Найдите правильное релятивистское выражение для энергии в примере 4.
10. Предположим, что волновая функция $\psi_1(x)$ на рис. 3.13, б при $x = x_0$ уменьшается в три раза, т. е. $\psi_1(x_0)/\psi_1(0) = 1/3$. Найдите выражение для E_1 в зависимости от \hbar , m и x_0 .
11. В момент времени $t = 0$ функция $|\psi(x)|^2$ волнового пакета представляет собой распределение Гаусса со среднеквадратичным отклонением σ_0 . Волновой пакет перемещается вдоль оси x со скоростью v_0 .
 - а) Огибающая волновой функции представляет собой также гауссову функцию. Найдите её среднеквадратичное отклонение.
 - б) Определите $B(k)$, где $\psi(x) = \int B(k) e^{ikx} dk$. Выразите ответ через m , \hbar , σ_0 , k и v_0 .

Задачи

1. Если функция $\psi = e^{i(k_0 + \Delta k)x - (\omega_0 + \Delta \omega)t}$, то чему равно $\psi^* \psi$?
2. Приведите выражение $\psi = A_1 e^{i\varphi_1} + A_2 e^{i\varphi_2}$ к виду $\psi = A e^{i\varphi}$. Найдите выражения для A и φ в зависимости от A_1, A_2, φ_1 и φ_2 .
3. Пусть $B(k)$ имеет вид, показанный на рисунке.
 - а) Чему равна вероятность того, что импульс $p = \hbar(k_0 + a/2)$ сравним по величине с импульсом $p = \hbar k_0$?
 - б) Что представляет собой волновая функция $\psi(x)$?
 - в) Чему равно произведение $\Delta x \Delta p$, если Δx и Δp – полуширины на половине максимальной высоты?



4. Докажите, что для величины x , распределённой по закону Гаусса, $\langle x^2 \rangle = \sigma^2$. Иными словами, докажите равенство

$$\int_0^{\infty} x^2 \exp(-x^2 / 2\sigma^2) dx \Big/ \int_0^{\infty} \exp(-x^2 / 2\sigma^2) dx = \sigma^2.$$

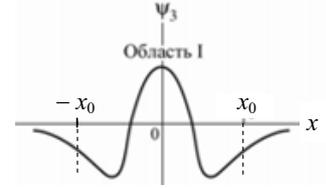
5. Какова вероятность обнаружить частицу с импульсом в интервале $\hbar(k_0 + a/2) > p > \hbar(k_0 - a/2)$, если $B(k)$ имеет вид, показанный на рисунке к задаче 3?
6. Если $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} = \hbar \omega$, чему равна групповая скорость $v_g = d\omega / dk$?
7. Расплывание волнового пакета описывается выражением

$$\Delta x = \sqrt{\left(\frac{\hbar t}{m \Delta x_0} \right)^2 + (\Delta x_0)^2},$$

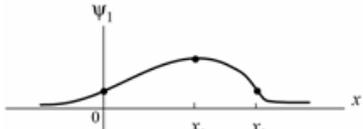
где Δx_0 – ширина пакета при $t = 0$, когда все монохроматические составляющие находятся в фазе. Пусть в момент времени $t = 0$ $\Delta x_0 = 10^{-10}$ м для электрона 1 и $\Delta x_0 = 10^{-9}$ м для электрона 2. Через какой промежуток времени волновые пакеты этих электронов будут иметь одну и ту же ширину?

8. Предположим, что электрон находится в потенциальной яме, изображённой на рис. 3.10, а, причём $x_0 = 10^{-14}$ м и $U_0 = 0$. Вычислите:
 - а) нерелятивистские значения энергий E_1 и E_2 и
 - б) релятивистские значения этих энергий.
9. Предположим, что электрон захвачен атомным ядром диаметром $2 \cdot 10^{-15}$ м. Какой была бы энергия электрона в основном состоянии? Используйте приближение одномерной прямоугольной потенциальной ямы.
10. Используя метод проб и ошибок, вычислите E_1 и E_2 для электрона в потенциальной яме глубиной $U_0 = 200$ эВ и шириной $2x_0 = 10^{-10}$ м.

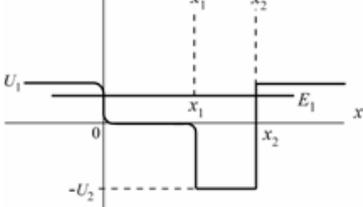
11. Предположим, что $\psi_3(x_0)/\psi_3(0) = -1/4$ (см. рисунок). Найдите выражение для E_3 через \hbar , m и x_0 , считая, что в области I функция ψ_3 представляет собой синусоиду.



12. Частица массой m находится в одномерной потенциальной яме, изображённой на рисунке. Чему равна E_1 , если на участке $(0; -x_1)$ функция ψ_1 воспроизводит $1/6$ периода синусоиды (60°)?



13. Подставьте в уравнение Шрёдингера с потенциалом $U(x) = kx^2/2$ функцию $\psi(x) = xe^{-\alpha x^2}$.



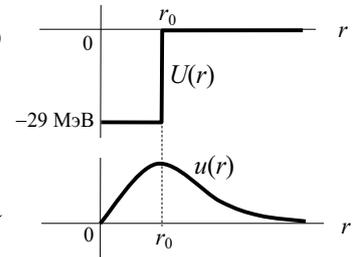
- а) Какова величина α ?
б) Чему равно соответствующее собственное значение энергии?

14. Уравнение Шрёдингера для частицы массой m записывается в виде

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{kx^2}{2} \right) \psi.$$

- а) Найдите наименьшую собственную функцию $\psi\psi_1(x)$.
б) Чему равно соответствующее собственное значение энергии E_1 в зависимости от \hbar , m и k ?

15. Потенциальную энергию, обеспечивающую связь протона с нейтроном в дейтроне, можно аппроксимировать прямоугольной потенциальной ямой, как показано на рисунке. Глубина такой ямы 29 МэВ, а радиус $r_0 = 2,3 \cdot 10^{-15}$ м. Обозначим волновую функцию $u(r)$. Внутри ямы она имеет вид: $u(r) = \sin kr$, где $(\hbar k)^2/(2M) = E - U$.



Приведённая масса системы протон–нейтрон равна $M = 8,36 \cdot 10^{-28}$ кг. Найдите численное значение энергии E (в МэВ). Это и будет энергия связи дейтрона. (Указание: можно использовать соотношение $\text{ctg}(k_1 x_0) = -k_2/k_1$.)

16. Подставляя волновую функцию $\psi = x \exp[-m\omega x^2/(2\hbar)]$ в уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi,$$

найдите энергию E .

17. Волновой пакет $\psi(x,t)$ составлен из чисто монохроматических волн: $\psi(x,t) = \int A(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$, где $A(k) = \exp\left(-\frac{(k - k_0)^2}{2a^2}\right)$. Чему равна

полуширина распределения вероятности по x при $t = 0$?

18. Отношение $|\psi(x_1)|^2$ при $x = x_1$ к $|\psi(x_0)|^2$ при $x = x_0$ называется проникаемостью барьера (коэффициентом прохождения). Вычислите проникаемость барьера (рис. 3.17.) для электрона, если: а) $U_0 - E = 1$ эВ и $x_1 - x_0 = 1$ Å; б) $U_0 - E = 10$ эВ и $x_1 - x_0 = 10$ Å. Ответ: а) 0,36; б) $8,5 \cdot 10^{-15}$.

4. КВАНТОВАЯ ФИЗИКА АТОМА

4.1. Приближённая теория атома водорода

В предыдущей главе была решена задача о движении частицы массой m в потенциальной яме вида $U = kx^2/2$. В параболическом потенциале частица совершает простое гармоническое движение. Рассмотрим потенциальную яму, в которой энергия меняется обратно пропорционально расстоянию. Потенциал такого типа отвечает гравитационным или электростатическим силам взаимодействия двух частиц. В атоме водорода потенциальная энергия взаимодействия электрона и протона имеет вид $U = -k_0 e^2/r$, где r — расстояние между частицами, $k_0 = 1/(4\pi\epsilon_0)$.

Найдём приближённое решение задачи. Аппроксимируем потенциал ямой прямоугольной формы, как это было сделано при рассмотрении гармонического осциллятора. Простые приближённые вычисления помогают получить наглядное представление об атоме водорода и избежать несущественных математических подробностей. Простая модель позволяет объяснить существование и характер стоячих электронных волн в случае атома водорода и их зависимость от фундаментальных констант h , m и e . Важно понять, почему разрешены лишь определённые энергетические уровни и как зависит их положение от фундаментальных констант и величины квантового числа n .

В приближённых расчетах используется потенциальная яма, изображённая на рис. 4.1. Электрон на уровне с энергией E , в соответствии с представлением классической физики, может удаляться на максимальное расстояние r_0 .

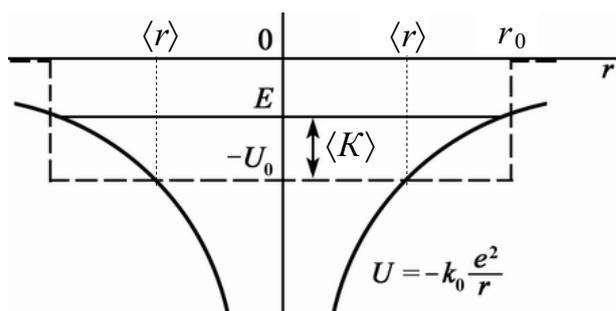


Рис. 4.1. Потенциальная яма для электрона в атоме водорода. Эквивалентная прямоугольная яма, используемая в приближённых вычислениях, показана штриховой линией

В качестве оценки среднего удаления $\langle r \rangle$ возьмём величину $r_0/2$. Глубину U_0 эквивалентной прямоугольной ямы определим как значение U при $x = \langle r \rangle$, т. е. $U_0 = k_0 e^2 / \langle r \rangle$. В случае стоячей волны n -порядка в пределах этой прямоугольной ямы (штриховая линия на рис. 4.1) уложится n полуволн. Таким образом,

$$n \frac{\langle \lambda_n \rangle}{2} = 2r_0 = 4\langle r \rangle \quad \text{или} \quad \langle \lambda_n \rangle = \frac{8\langle r \rangle}{n}.$$

Средний импульс электрона приблизительно равен импульсу де Бройля, т. е.

$$\langle p_n \rangle \approx \frac{h}{\langle \lambda_n \rangle} = \frac{hn}{8\langle r \rangle}.$$

Средняя кинетическая энергия

$$\langle K_n \rangle = \frac{\langle p_n \rangle^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{128m\langle r \rangle^2}.$$

Из рис. 4.1 следует, что

$$\langle K \rangle = -\langle E \rangle = \frac{1}{2} \frac{k_0 e^2}{\langle r \rangle}.$$

Сравнивая это выражение с предыдущим, получаем

$$\frac{1}{2} \frac{k_0 e^2}{\langle r \rangle} \approx \frac{h^2 n^2}{128m\langle r \rangle^2},$$

откуда находим

$$\langle r \rangle \approx \frac{h^2 n^2}{64k_0 m e^2} = \frac{4\pi^2}{64} \cdot \frac{\hbar^2}{k_0 m e^2} n^2.$$

«Размер» n -гармоники волновой функции близок к найденному ранее значению, а именно:

$$r_n = \frac{\hbar^2}{k_0 m e^2} n^2.$$

Подставляя $\langle r \rangle$ в выражение для $\langle K \rangle$, получим приближённое решение для энергетических уровней:

$$E_n = -\frac{16}{\pi^2} \cdot k_0^2 \frac{m e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}.$$

Точный результат записывается в виде

$$E_n = -\frac{k_0^2 m e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2},$$

что на 38 % меньше величины, полученной с использованием довольно грубого приближения. Приближённое решение в действительности даёт правильную зависимость от m , e , \hbar и квантового числа n , а также позволяет разобраться в физике процесса.

На самом деле формула

$$E_n = -\frac{k_0^2 m Z^2 e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}$$

не совсем точна (для водорода $Z = 1$, для гелия $Z = 2$).

Как рассказывал автор этой формулы Нильс Бор, в результате опытов Ивенса (*Evans*) по измерению спектров атомов водорода и ионизованных атомов гелия, возникла драматическая ситуация: оказалось, что формула для спектра водорода не даёт при замене в ней заряда ядра с $Z = 1$ на $Z = 2$ точного совпадения со спектром ионизованного гелия. Однако Бор вскоре объяснил это расхождение, указав на необходимость учитывать движение ядра. В формулу нужно вставлять не массу m свободного электрона, а его приведённую массу $mM/(m + M)$, где M — масса ядра, которая имеет различные значения для водорода и гелия.

4.2. Уравнение Шрёдингера в трёх измерениях

Двухмерные стоячие волны можно возбудить в заполненной жидкостью кювете прямоугольной формы. При постукивании или вибрации в ней возбуждаются стоячие волны, причём линии узлов располагаются во взаимно перпендикулярных направлениях, как показано на рис. 4.2.

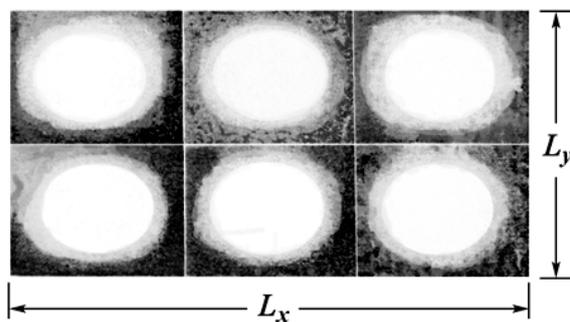


Рис. 4.2. Изображённый художником бак с водой, покрытой рябью, в двух измерениях. Длина бака L_x , ширина L_y ; изображены стоячие волны с $n_x = 3$ и $n_y = 2$

Амплитуда волны записывается в виде

$$\psi = A \sin k_x x \cdot \sin k_y y,$$

где $k_x = \frac{\pi}{L_x} n_x$ и $k_y = \frac{\pi}{L_y} n_y$.

Она удовлетворяет граничному условию $\psi = 0$ при $x = L_x$ или $y = L_y$.

Найдём выражение для энергетических уровней частицы массой m в трёхмерном ящике с линейными размерами L_x , L_y и L_z . Кинетическая энергия частицы

$$K = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}.$$

В соответствии с соотношением де Бройля имеем

$$p_x = \hbar k_x, \quad p_y = \hbar k_y, \quad p_z = \hbar k_z.$$

Следовательно,

$$K = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2).$$

Используя соотношение для k_x , k_y , и аналогично для k_z , получаем

$$K = E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right).$$

В трёхмерном пространстве собственные значения энергии и соответствующие им собственные функции зависят от трёх квантовых чисел (число степеней свободы).

Пусть электрон находится в ящике кубической формы размером с атомное ядро ($L = 4 \cdot 10^{-15}$ м). Найдём минимальную кинетическую энергию электрона. Можно записать для стоячих волн компоненты волнового вектора:

$$k_x = \frac{\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{\pi}{L} n_z.$$

Состоянию с минимальной энергией отвечает $n_x = n_y = n_z = 1$:

$$k_x^2 = k_y^2 = k_z^2 = \frac{\pi^2}{L^2};$$

$$p^2 = \hbar^2 k^2 = \hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = 3\hbar^2 \left(\frac{\pi^2}{L^2} \right).$$

Воспользуемся релятивистской формулой для кинетической энергии: $K = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} - mc^2 = 4,28 \cdot 10^{-11}$ Дж = 267 МэВ. Полученное значение K более чем в 500 раз превосходит энергию покоя электрона, поэтому применять релятивистскую формулу для K было необходимо.

Этот пример демонстрирует, почему электрон не может находиться внутри атомного ядра. В природе нет сил, величина которых обеспечила бы связь электронов, обладающих столь большой энергией с группой протонов и нейтронов. Заметим, что электростатическая потенциальная энергия электрона на поверхности ядра составляет лишь 10 МэВ, а не 267 МэВ.

В рассмотренных примерах волновая функция частицы имеет вид

$$\psi = A \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z.$$

Частные производные от этого выражения по x :

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = k_x A \cos k_x x \cdot \cos k_y y \cdot \cos k_z z$$

(символ $\partial/\partial x$ означает дифференцирование по переменной x при постоянных y и z) и

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k_x^2 A \sin k_x x \cdot \sin k_y y \cdot \sin k_z z = -k_x^2 \psi.$$

Аналогично имеем для производных по остальным координатам. Таким образом,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -k^2 \psi.$$

Если потенциальная энергия постоянна и равна U_0 , то

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0).$$

Как и в случае одномерной задачи, обобщим уравнение Шрёдингера на случай меняющейся потенциальной энергии $U(x,y,z)$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi$$

(стационарное уравнение Шрёдингера в трех измерениях).

Во многих прикладных задачах потенциальная энергия зависит только от расстояния $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ до начала координат. В этих случаях уравнение Шрёдингера удобнее переписать в сферических координатах, которые связаны с декартовыми, рис. 4.3, соотношениями:

$$x = r \sin \theta \cdot \cos \varphi; \quad y = r \sin \theta \cdot \sin \varphi; \quad z = r \cos \theta.$$

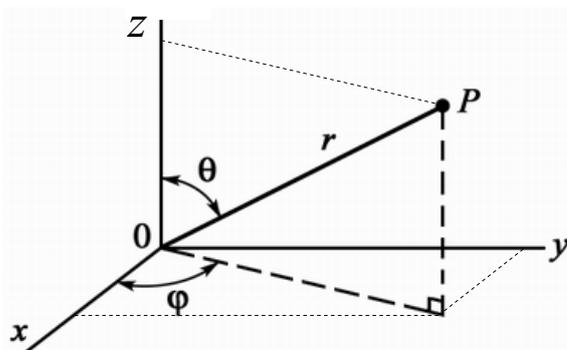


Рис. 4.3. Декартовы (x, y, z) и сферические (r, θ, φ) координаты точки P

Переход в уравнении Шрёдингера от координат x , y и z к сферическим координатам требует громоздких вычислений. В итоге имеем:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi.$$

Набор квантовых чисел, исчерпывающе определяющий состояние квантовой системы, называется полным. Совокупность состояний, отвечающая всем возможным значениям квантовых чисел из полного набора, образует полную систему состояний. Так, состояния электрона в атоме определяются четырьмя квантовыми числами соответствующих четырём степеням свободы, связанным с тремя пространственными координатами (r , θ , φ) и спином. Для атома водорода и водородоподобных атомов — это n — главное квантовое число ($n = 1, 2 \dots$), l — орбитальное квантовое число ($l = 0, 1 \dots n - 1$), m_l — магнитное квантовое число ($|m_l| \leq l$) — проекция орбитального момента на некоторое направление и m_s — квантовое число проекции спина ($m_s = \pm 1/2$).

4.3. Строгая теория атома водорода

Чтобы получить уравнение Шрёдингера для атома водорода, в последнее уравнение нужно подставить $U = -k_0 e^2 / r$. В качестве решения выберем экспоненциальную функцию $\psi = e^{-r/a}$. Поскольку в случае сферической симметрии частные производные $\partial \psi / \partial \theta$ и $\partial \psi / \partial \varphi$ обращаются в нуль, то

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial (e^{-r/a})}{\partial r} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{k_0 e^2}{r} \right) e^{-r/a};$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(-\frac{r^2}{a} e^{-r/a} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{k_0 e^2}{r} \right) e^{-r/a};$$

$$\frac{1}{r^2} \left(\frac{r^2}{a^2} - \frac{2r}{a} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{k_0 e^2}{r} \right);$$

$$\left[\frac{1}{a^2} \right] - \left(\frac{2}{a} \right) \frac{1}{r} = \left[-\frac{2mE}{\hbar^2} \right] - \left(\frac{2mk_0 e^2}{\hbar^2} \right) \frac{1}{r}.$$

Приравнивая слагаемые, содержащие $1/r$, и свободные члены, находим

$$\frac{2}{a} = \frac{2mk_0e^2}{\hbar^2}; \quad a = \frac{\hbar^2}{k_0me^2}, \text{ а}$$

$$\frac{1}{a^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}; \quad E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}.$$

Подставляя в E выражение для a , находим

$$E = -k_0^2 \frac{me^4}{2\hbar^2}.$$

Простая экспоненциальная функция действительно является решением, если a и E принимают найденные значения. Подстановка численных значений m , k_0 , e и \hbar даёт $E = -21,8 \cdot 10^{-19}$ Дж = $-13,6$ эВ. Это и есть минимальное количество энергии, необходимое для удаления электрона из атома водорода. По определению эта энергия называется энергией связи или потенциалом ионизации:

(энергия связи) = $-E$ = (энергия, необходимая для удаления электрона).

Согласно данному определению, энергия связи электрона в металле совпадает с работой выхода W_0 , поскольку наивысший энергетический уровень на рис. 6.4 расположен именно при $E = -W_0$.

При $r = a$ амплитуда волны уменьшается в e раз по сравнению с максимальным значением. В этой точке $e^{-r/a} = 1/e$. Данное значение r_1 выбирается в качестве радиуса атома водорода. Используя выражение для a , находим

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{k_0me^2} = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ м} = 0,53 \text{ \AA} \quad (\text{радиус атома водорода}).$$

Функция $\psi_1 = e^{-r/a}$ не имеет узлов и представляет собой стоячую волну низшего порядка, а энергия соответствует основному уровню. Обозначим её E_1 . Волновые функции для следующих двух энергетических уровней записываются в виде

$$\psi_2 = \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \quad \text{и} \quad \psi_3 = \left(1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2r^2}{27a^2}\right) e^{-r/3a}.$$

Графики всех этих функций приведены на рис. 4.4, а. Эти функции действительно удовлетворяют уравнению Шрёдингера при условии, что $E_2 = E_1/2^2$ и $E_3 = E_1/3^2$. На рис. 4.4, б показано пространственное распределение относительной вероятности найти электрон в шаровом слое единичной ширины для трёх волновых функций. Хорошо видно, что электрон в состоянии $n = 2$ ($l = 0$) в среднем находится примерно в 4 раза дальше от ядра, чем в состоянии $n = 1$.

Покажем, что функция $\psi_2(r)$ является решением уравнения Шредингера для атома водорода, и найдём энергию E_2 соответствующего уровня. Вычислим первую производную:

$$\frac{\partial \psi_2}{\partial r} = -\frac{1}{2a} \left(2 - \frac{r}{2a} \right) e^{-r/2a}.$$

Затем найдём

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_2}{\partial r} \right) = -\frac{1}{2a} \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(2r^2 - \frac{r^3}{2a} \right) e^{-r/2a} \right];$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_2}{\partial r} \right) = \left(-\frac{2}{ar} + \frac{5}{4a^2} - \frac{r}{8a^3} \right) e^{-r/2a}.$$

В соответствии с уравнением Шрёдингера последнее выражение равно $-(2m/\hbar^2)(E + k_0 e^2/r)\psi$.

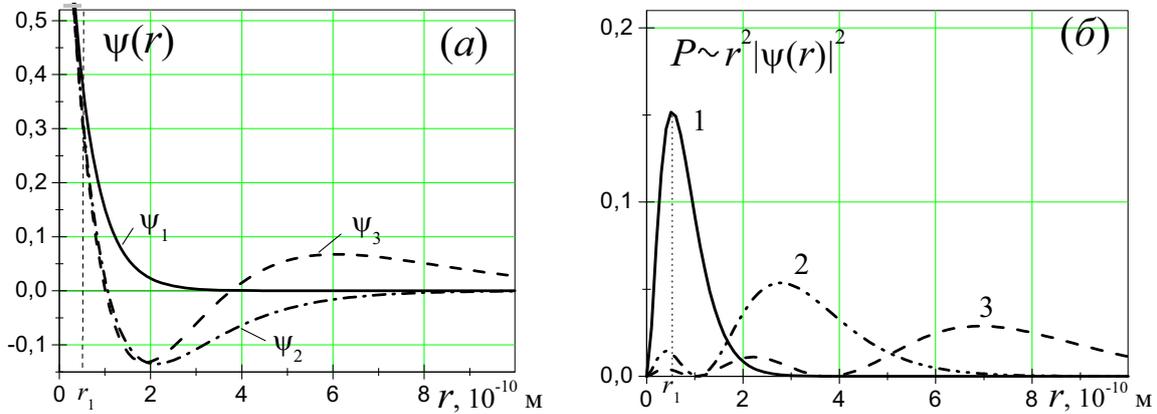


Рис. 4.4. Волновые функции атома водорода, соответствующие $n = 1, 2, 3$ и $l = 0$ (а); (б) – пространственное распределение относительной вероятности нахождения электрона в шаровом слое единичной ширины для волновых функций: 1 – ψ_1 ; 2 – ψ_2 ; 3 – ψ_3 (площади под кривыми примерно равны)

Соответственно,

$$-\frac{2}{ar} + \frac{5}{4a^2} - \frac{r}{8a^3} = -\frac{2mk_0 e^2}{\hbar^2 r} - \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{k_0 e^2}{2a} \right) + \frac{mE}{a\hbar^2} r.$$

Приравнивая друг другу слагаемые, содержащие одинаковые степени $1/r$, находим

$$-\frac{2}{a} = -\frac{2mk_0 e^2}{\hbar^2},$$

откуда, как и прежде, имеем $a = \hbar^2/(k_0 m e^2)$. Из сравнения слагаемых при r следует, что

$$-\frac{1}{8a^3} = \frac{mE_2}{a\hbar^2};$$

$$E_2 = -\frac{\hbar^2}{8a^2 m}.$$

Подставляя сюда $\hbar^2/(k_0 m e^2)$ вместо a , окончательно получаем

$$E_2 = -\frac{1}{4} \cdot k_0^2 \frac{m e^4}{2\hbar^2} = -\frac{1}{4} \cdot 13,6 \text{ [эВ]}.$$

Энергетическим уровням атома водорода –

$$E_n = -\frac{1}{n^2} k_0^2 \frac{m e^4}{2\hbar^2},$$

где n – целое положительное число – отвечают решения в виде стоячих волн. Величина n называется главным квантовым числом. Главное квантовое число однозначно характеризует энергию электрона в атоме. Для полного описания трёхмерной стоячей волны необходимы ещё два квантовых числа – l и m_l . Эти числа характеризуют момент импульса частицы и его проекцию на выбранное направление.

4.4. Орбитальный момент импульса

Момент количества движения (момент импульса) является одной из важнейших характеристик движения как отдельных частиц, так и целых систем (например, атомов). Момент количества движения изолированной частицы или замкнутой системы частиц при движении сохраняется. Момент сохраняется и в микромире при движении в центрально-симметричных полях. Рассмотрим квантово-механические особенности момента количества движения микрочастиц.

4.4.1. Проекция момента количества движения

Предположим, что волновой пакет с волновым числом k движется по окружности радиусом r , как показано на рис. 4.5. Такой пакет имеет момент импульса относительно оси z , равный

$$L_z = p r = (\hbar k) r.$$

На дуге s волновую функцию пакета можно записать в виде

$$\psi \sim e^{i(ks - \omega t)} = e^{i(kr\varphi - \omega t)}.$$

Волновая функция ψ должна быть непрерывной и однозначной во всех точках пространства. Функция $\psi(\varphi)$ однозначна только в том случае, если при изменении φ на 2π она возвращается к своему прежнему значению, т. е. $\psi(0) = \psi(2\pi)$. Следовательно,

$$e^{ikr(0)} = e^{ikr(2\pi)} \quad \text{или} \quad 1 = e^{i2\pi kr}.$$

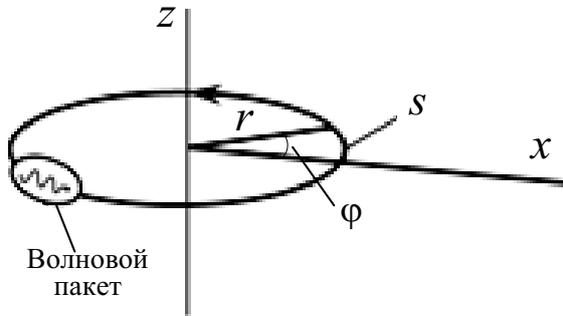


Рис. 4.5. Волновой пакет, движущийся по окружности радиусом r . Длина дуги $s = r\varphi$

Это соотношение выполняется, если

$$kr = m_l,$$

где m_l — целое число (положительное, отрицательное, равно нулю). Умножив обе части этого равенства на \hbar , имеем

$$\hbar kr = m_l \hbar,$$

или

$$L_z = m_l \hbar.$$

Волновая функция имеет вид

$$e^{ikr\varphi - i\omega t} = e^{im_l\varphi - i\omega t}.$$

Волновая функция частицы, содержащая множитель вида $e^{im_l\varphi}$, соответствует частице с составляющей момента импульса вдоль оси z , равной $L_z = m_l \hbar$ ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$).

Итак, проекция момента импульса квантуется на любую ось; она равна целому числу постоянных Планка. Иными словами, L_z может принимать значения $0, \pm \hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar$ и т. д.

Исследуем физический смысл этого результата. Рассмотрим некоторый вектор момента количества движения \mathbf{L} . На первый взгляд может показаться, что квантование проекции L_z приводит к тому, что вектор \mathbf{L} может составлять лишь определённые углы с осью z (рис. 4.6). Однако поскольку ось z в пространстве может быть направлена как угодно, эта точка зрения не имеет смысла. Полученный результат имеет другой смысл. Формула $L_z = m_l \hbar$ показывает, что при измерении (чаще всего в магнитном поле) проекции момента импульса обязательно получается число, кратное \hbar . Но значение L_z до проведения

опыта вовсе не должно быть равно целому числу \hbar . До опыта и после него ψ -функции вовсе не обязаны совпадать.

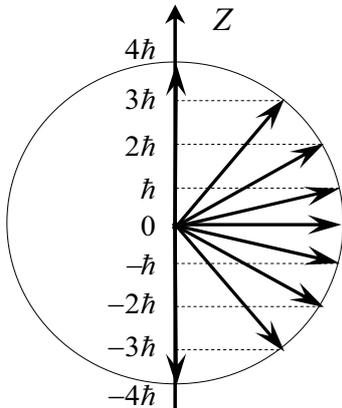


Рис. 4.6. Квантование проекции момента импульса L_z на ось z . Показан случай, когда $|m_l| \leq l = 4$. Максимальное значение проекции момента импульса $(L_z)_{max} = 4\hbar$

4.4.2. Квадрат момента количества движения

Найдём теперь возможные значения квадрата момента количества движения \mathbf{L}^2 . Прямой подход к решению уравнения Шрёдингера требует знакомства со специальными функциями (с полиномами Лежандра). Поэтому мы подойдём к задаче с несколько другой стороны.

В классической механике квадрат момента количества движения равен сумме квадратов его проекций на координатные оси:

$$\mathbf{L}^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2.$$

В квантовой механике это равенство следует понимать как формулу, связывающую соответствующие средние значения:

$$\langle \mathbf{L}^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle.$$

Рассмотрим частицу, движущуюся в сферически-симметричном поле. Пусть квадрат её момента количества движения имеет некоторое определённое значение. Задание квадрата момента импульса определяет состояние частицы не полностью, так как при этом проекция момента количества движения на ось z может принимать разные значения. Так как ось z ничем не выделена из остальных координатных осей, то при сферически-симметричном состоянии частицы

$$\langle L_x^2 \rangle = \langle L_y^2 \rangle = \langle L_z^2 \rangle$$

и, следовательно,

$$\mathbf{L}^2 = 3\langle L_z^2 \rangle.$$

В симметричном решении все проекции на любую ось, в том числе и на ось z , равновероятны, поэтому $\langle L_z^2 \rangle$ равно среднему из всех возможных значений L_z^2 .

Согласно $L_z = m_l \hbar$ возможные значения L_z равны целому числу постоянных Планка \hbar : $L_z = 0, \pm\hbar, \pm 2\hbar, \pm 3\hbar \dots \pm l\hbar$.

Максимальное значение проекции момента L_z по абсолютной величине не может превышать $|\mathbf{L}|$. Выпишем полный набор возможных значений L_z и m_l :

$$L_z = l\hbar, (l-1)\hbar, (l-2)\hbar \dots (-l)\hbar, \\ m_l = l, (l-1), (l-2) \dots -(l-1), -l.$$

Мы видим, что при всяком данном l проекция момента L_z может принимать $(2l+1)$ различных значений: одно нулевое, l положительных и l отрицательных. Среднее значение $\langle L_z^2 \rangle$ равно поэтому

$$\langle L_z^2 \rangle = \hbar^2 \frac{l^2 + (l-1)^2 + \dots + (-l)^2}{2l+1} = \frac{2\hbar^2}{2l+1} (1^2 + 2^2 + 3^2 + \dots + l^2) = \\ = \frac{2\hbar^2}{2l+1} \cdot \frac{l(l+1)(2l+1)}{6} = \frac{\hbar^2}{3} l(l+1).$$

Подставив полученное значение $\langle L_z^2 \rangle$ в $\mathbf{L}^2 = 3\langle L_z^2 \rangle$, получим

$$\mathbf{L}^2 = \hbar^2 l(l+1), \text{ или } L = \hbar \sqrt{l(l+1)},$$

где l — целое положительное число (или нуль). Это равенство определяет закон квантования квадрата момента количества движения.

Сравнение формул — $L_z = l\hbar$ и $L = \hbar \sqrt{l(l+1)}$ — показывает, что $(L_z^2)_{\max} < \mathbf{L}^2$ при любом значении $l > 0$, так как $(L_z^2)_{\max} = \hbar^2 l^2$, а $\mathbf{L}^2 = \hbar^2 l(l+1)$.

Этот результат, непонятный в рамках классической физики, легко объясняется в квантовой механике. Исследование показывает, что у микрочастиц не могут быть одновременно известны проекции момента на две различные оси, например, L_x и L_y ; для них существует соотношение неопределённости, аналогичное соотношению неопределённости для координаты и импульса. Зафиксировав состояние с определённым L_z , мы вносим неопределённость в проекции L_x и L_y . Средние значения $\langle L_x^2 \rangle$ и $\langle L_y^2 \rangle$ в таких «размазанных» состояниях, конечно, отличны от нуля: $\langle L_x^2 \rangle > 0$ и $\langle L_y^2 \rangle > 0$. Поэтому

$$\mathbf{L}^2 = [\langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle] > (L_z^2)_{\max}.$$

Квадрат момента \mathbf{L}^2 и одна из его проекций, например L_z , могут быть определены одновременно (мы примем это утверждение без доказательства). Более того, в квантовой механике доказывается, что задание L_z и \mathbf{L}^2 полностью определяют вращательное состояние тела.

В классическом пределе ($\hbar \rightarrow 0, l \rightarrow \infty$) $L^2 = (L_z^2)_{\max}$.

До сих пор мы рассматривали решения уравнения Шрёдингера, которые являются только функцией от r . Существуют и другие решения, зависящие от θ и φ . В общем виде решение записывается как

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = R_n(r) \cdot \Theta_{l,m_l}(\theta) \cdot \Phi_{m_l}(\varphi),$$

где $\Phi_{m_l}(\varphi) = e^{im_l\varphi}$.

Волновой функции ψ_{n,l,m_l} соответствует составляющая момента импульса вдоль оси z , равная $m_l\hbar$.

Для $n = 2, l = 0, m_l = 0$ решение известно:

$$\psi_{2,0,0} = \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}.$$

Наряду с ним существуют и другие решения:

$$\psi_{2,1,1} = re^{-r/2a} \sin\theta \cdot e^{i\varphi};$$

$$\psi_{2,1,0} = re^{-r/2a} \cos\theta;$$

$$\psi_{2,1,-1} = re^{-r/2a} \sin\theta \cdot e^{-i\varphi}.$$

Эти решения можно проверить, подставляя их непосредственно в исходное уравнение Шрёдингера. На рис. 4.7 приведены контурные диаграммы электронной плотности, отвечающие волновым функциям с $n = 2$.

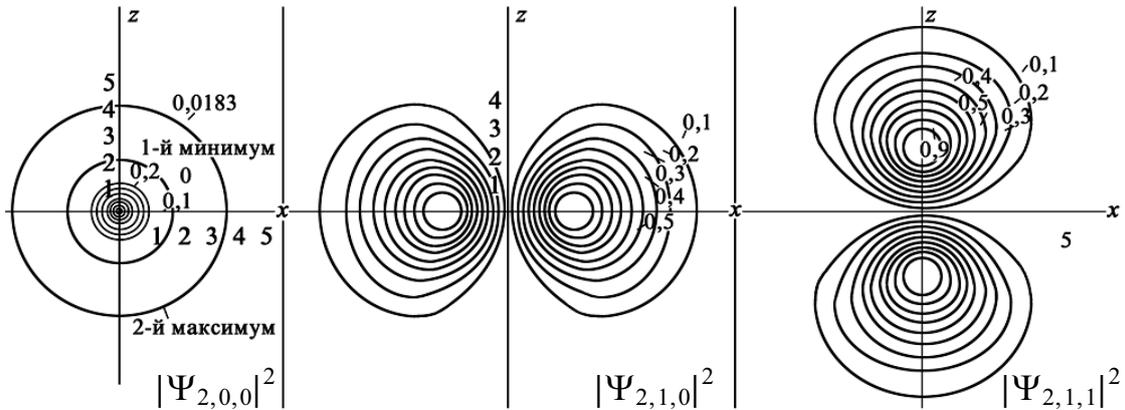


Рис. 4.7. Распределения электронного облака $|\psi|^2$ в плоскости xz для волновых функций атома водорода с $n = 2$. Показаны контурные линии равной вероятности (значения соответствующих вероятностей указаны числами). Максимальная вероятность выбрана равной 1. Масштаб осей x и z соответствует ангстремам ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ м}$)

Заметим, что при $n = 2$ орбитальное квантовое число l может принимать два значения: 0 или 1; при $l = 1$ магнитное квантовое число m_l имеет три допустимых значения: 0, 1 и -1 . Этим четырём функциям отвечает один и тот же энергетический уровень $E_2 = (1/4) \cdot (13,6 \text{ эВ})$. Вооб-

ше, каждой волновой функции, или собственной функции, соответствует свой единственный энергетический уровень, или собственное значение. Однако кулоновский потенциал обладает особым свойством: всем собственным функциям с одним и тем же квантовым числом n соответствует единственное собственное значение энергии. Значение орбитального квантового числа l никогда не превосходит $(n - 1)$, а магнитное квантовое число m_l пробегает ряд целочисленных значений от $-l$ до $+l$.

Таблица 4.1

Возможные комбинации l и m_l для случая $n = 3$

l	m_l				
0			0		
1		-1	0	1	
2	-2	-1	0	1	2

В качестве примера возьмем случай $n = 3$. Возможные комбинации из трёх квантовых чисел приведены в табл. 4.1. Возможно всего девять различных комбинаций и имеется девять различных волновых функций, зависящих от r , θ и φ . Всем им отвечает одна и та же энергия $E_3 = (1/9) \cdot (13,6 \text{ эВ})$.

Найдём число различных волновых функций для $n = 4$. Возможные значения l равны 0, 1, 2, 3. Из табл. 4.1 следует, что значениям $l = 0, 1$ и 2 соответствуют девять волновых функций. Дополнительному значению $l = 3$ отвечают ещё семь функций со значениями m_l от -3 до $+3$. Полное число функций $(7 + 9) = 16$, т. е. всегда n^2 .

Таблица 4.2

Ненормированные радиальные и угловые функции, используемые при построении полных волновых функций ψ_{n,l,m_l} для атома водорода ($\rho \equiv r/a$)

$R_{n,l}(\rho)$	$\Theta_{l,m_l} = -\Theta_{l,-m_l}$		
R_{10}	$e^{-\rho}$	Θ_{00}	1
R_{20}	$(1-\rho/2) \cdot e^{-\rho/2}$	Θ_{10}	$\cos\theta$
R_{21}	$\rho e^{-\rho/2}$	Θ_{11}	$\sin\theta$
R_{30}	$\left(1 - \frac{2\rho}{3} + \frac{2\rho^2}{27}\right) e^{-\rho/3}$	Θ_{20}	$3\cos^2\theta - 1$
R_{31}	$\rho(1-\rho/6) e^{-\rho/3}$	Θ_{21}	$\sin\theta \cos\theta$
R_{32}	$\rho^2 e^{-\rho/3}$	Θ_{22}	$\sin^2\theta$
$R_{n,n-1}$	$\rho^{(n-1)} e^{-\rho/n}$	Θ_{ii}	$\sin^i\theta$

Используя табл. 4.2 и выражение

$$\psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \varphi) = R_n(r) \cdot \Theta_{l,m_l}(\theta) \cdot e^{im_l\varphi},$$

можно построить различные волновые функции. На рис. 4.8 приведены контурные диаграммы $|\psi|^2$ в плоскости xz .

Следует заметить, что при больших n распределение $|\psi|^2$, отвечающее $l = (n - 1)$, концентрируется на окружности радиусом $n^2 a$ с центром на оси z . Это предсказанная Бором орбита, с той разницей, что электрон равномерно «размазан» по круговой орбите.

4.4.3. Нормировка волновых функций

Определим величину $|\psi|^2 dx dy dz$ как относительную вероятность того, что частица заключена в элементе объема $dx dy dz$. Эту величину можно рассматривать так же, как абсолютную вероятность, если она удовлетворяет условию

$$\iiint_{\text{По всему пространстве}} |\psi|^2 dx dy dz = 1.$$

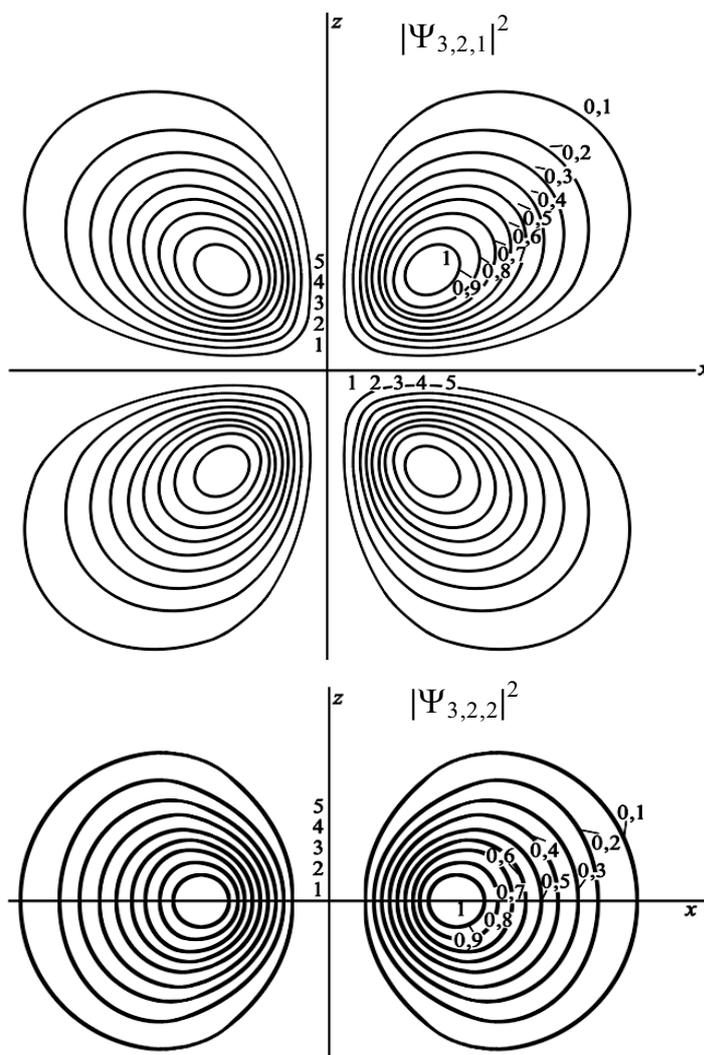


Рис. 4.8. Изображено то же, что и на рис. 4.7, но для случая двух волновых функций атома водорода с $n = 3$

Условие нормировки однозначно определяет коэффициент пропорциональности волновой функции. До этого рассматривались лишь относительные вероятности без учёта нормировки волновых функций.

4.4.4. Среднее значение

Пусть волновая функция частицы представляет собой суперпозицию нескольких собственных функций. Иными словами,

$$\psi(x) = \sum_j a_j \psi_j(x),$$

где каждая из ψ_j — нормированная собственная функция, которая отвечает собственному значению энергии E_j . Вероятность найти частицу в состоянии, характеризуемом волновой функцией ψ_j , даётся квадратом амплитуды a_j . Вероятность найти частицу в состоянии с энергией E_j равна $|a_j|^2$. Среднее значение энергии можно записать в виде

$$\langle E \rangle = \sum_j |a_j|^2 E_j.$$

Такое среднее значение энергии даёт серия повторных измерений, произведённых над частицей, которая каждый раз находится в одном и том же начальном состоянии $\psi(x)$. То же самое справедливо для любой другой физической величины, в частности для момента импульса:

$$\langle L_z \rangle = \sum_j |a_j|^2 L_j.$$

Рассмотрим атом водорода в состоянии с $n = 2$ и $l = 1$. Имеем $L_z = \hbar$, а волновая функция записывается в виде

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{2,1} \cdot \Theta_{1,1}(\theta) \cdot e^{i\varphi}.$$

Предположим, что измерительный прибор находится в штрихованной системе координат, ось z' которой повернута на угол α относительно оси z . Найдём величину $\langle L_z' \rangle$, измеренную прибором. Для этого сделаем некоторые тригонометрические преобразования, в результате получим

$$\Theta_{11}(\theta) e^{i\varphi} = \frac{1}{2}(\cos \alpha + 1) \Theta_{11}(\theta') e^{i\varphi} - \frac{\sin \alpha}{\sqrt{2}} \Theta_{10}(\theta') + \frac{1}{2}(\cos \alpha - 1) \Theta_{1,-1}(\theta') e^{i\varphi}.$$

В штрихованной системе координат исходная волновая функция имеет следующий вид:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = a_1 \psi_1(r, \theta', \varphi') + a_2 \psi_2(r, \theta', \varphi') + a_3 \psi_3(r, \theta', \varphi'),$$

где $a_1 = \frac{\cos \alpha + 1}{2}$, $a_2 = \frac{-\sin \alpha}{\sqrt{2}}$, $a_3 = \frac{\cos \alpha - 1}{2}$.

Функция ψ_1 содержит $\Theta_{11}(\theta')e^{i\varphi'}$, следовательно, $L'_z = \hbar$; ψ_2 отвечает $L'_z = 0$, а ψ_3 соответствует $L'_z = -\hbar$. Таким образом,

$$\langle L'_z \rangle = a_1^2(+\hbar) + a_2^2(0) + a_3^2(-\hbar) =$$

$$\psi = \frac{(\cos \alpha + 1)^2}{4} (+\hbar) + \frac{(\cos \alpha - 1)^2}{4} (-\hbar) = \hbar \cos \alpha.$$

Полученный результат одинаков как в квантовой, так и в классической физике (в классической физике проекция вектора \mathbf{L} на ось z равна $L_z = L \cos \alpha$, где α – угол между осью z и вектором \mathbf{L}).

4.5. Испускание фотонов

Когда уравнение Шрёдингера было написано, квантовая механика стала применяться в теории электромагнитных взаимодействий, в результате чего возникла квантовая электродинамика. Нам понадобится установленный квантовой электродинамикой факт, что заряженная частица может поглощать или испускать отдельные фотоны и что теория позволяет точно рассчитать соответствующие амплитуды вероятностей поглощения или испускания.

4.5.1. Спонтанное излучение

Рассмотрим заряженную частицу массой m , закреплённую на пружине с коэффициентом упругости k , которой соответствует частота собственных колебаний $\omega_0 = \sqrt{k/m}$. Если пружину растянуть, а затем отпустить, то прикреплённая к ней заряженная частица в соответствии с классической физикой будет излучать на частоте ω_0 .

На языке квантовой механики это означает, что частицу из основного состояния перевели на более высокий энергетический уровень. Электрон, находящийся на энергетическом уровне выше основного состояния, может с определённой вероятностью испустить фотон и перейти на более низкий энергетический уровень. Такой процесс называется спонтанным излучением. Если у атома водорода два уровня различаются по энергии на несколько электронвольт, то амплитуда вероятности перехода между этими уровнями оказывается такой, что типичное время, необходимое для процесса испускания фотона, составляет порядка 10^{-8} с (п. 4.9). Если фотон испускается в результате перехода между уровнями с энергиями E_n и E_k , то его энергия $h\nu = E_n - E_k$. Частота такого фотона равна $(E_n - E_k)/h$.

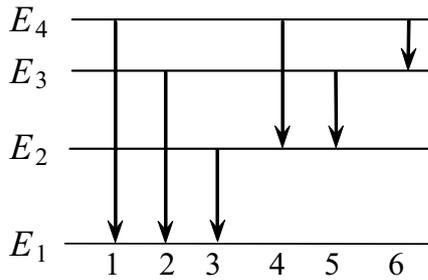


Рис. 4.9. Шесть возможных переходов между четырьмя энергетическими уровнями

Если атом имеет четыре различных энергетических уровня, как показано на рис. 4.9, то возможны шесть различных переходов с более высоких уровней на более низкие. Излучаемый атомом «свет» будет характеризоваться шестью различными частотами. Если анализировать это излучение спектро스코пом, то можно увидеть шесть спектральных линий. В нормальных условиях атомы находятся в основном состоянии и не излучают. Однако если газ, состоящий из этих атомов, нагревается или в нём происходит электрический разряд, то вследствие столкновений некоторые атомы приобретут энергию и перейдут на уровни с более высокой энергией. Именно эти относительно немногочисленные атомы в состояниях с более высокой энергией и испускают фотоны.

Согласно современной теории фотоны представляют собой элементарные частицы со спином, равным 1 ($L = \hbar$). Поэтому при испускании фотона орбитальное квантовое число атома l изменяется, по меньшей мере, на единицу.

4.5.2. Спектр атома водорода

Поскольку мы располагаем количественным соотношением для энергетических уровней атома водорода, можно рассчитать весь его спектр. Пусть энергия более высокого возбуждённого уровня равна

$$E_k = -k_0^2 \frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{k^2},$$

а энергия более низкого уровня —

$$E_n = -\frac{k_0^2 me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Тогда частоты, соответствующие различным спектральным линиям, можно записать в виде

$$\nu_{nk} = \frac{k_0^2 me^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right).$$

Серия спектральных линий, отвечающая $n = 1$, называется серией Лаймана. Все линии этой серии расположены в ультрафиолетовой области спектра электромагнитного излучения. При $n = 2$ возникает другая серия линий, называемая серией Бальмера. Спектр атомарного водорода приведен на рис. 4.10, а, а некоторые из соответствующих переходов между уровнями показаны с помощью диаграмм энергетических уровней на рис. 4.10, б. На этих диаграммах по горизонтали принято изображать состояния с различными значениями момента импульса.

Определим длины волн, соответствующие линиям серии Бальмера, и линии, расположенные в видимой части спектра. Энергии испускаемых фотонов вычисляются по формуле:

$$h\nu = 13,6 \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \text{ эВ, где } k = 3, 4, 5 \dots$$

Первым четырем линиям спектра соответствуют значения энергии:

$$\begin{aligned} h\nu_1 &= 13,6 \cdot (1/4 - 1/9) = 1,89 \text{ эВ;} \\ h\nu_2 &= 13,6 \cdot (1/4 - 1/16) = 2,55 \text{ эВ;} \\ h\nu_3 &= 13,6 \cdot (1/4 - 1/25) = 2,86 \text{ эВ;} \\ h\nu_4 &= 13,6 \cdot (1/4 - 1/36) = 3,02 \text{ эВ.} \end{aligned}$$

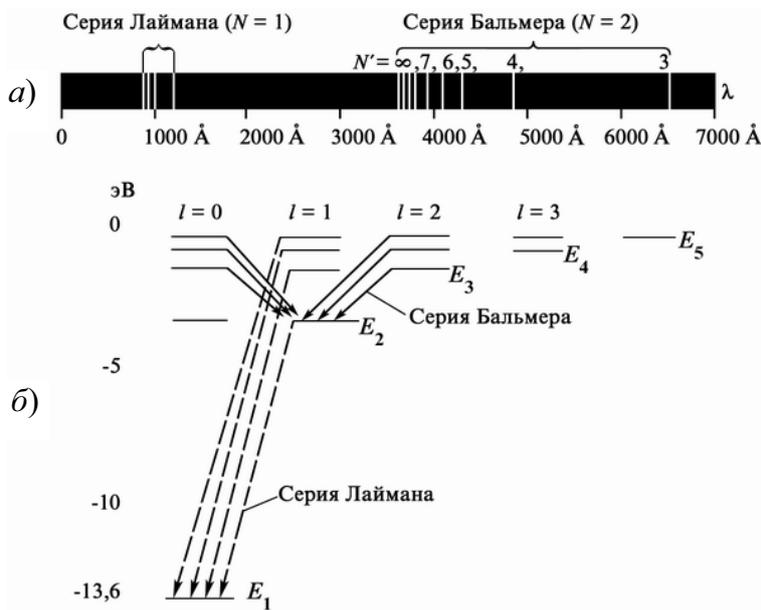


Рис. 4.10. Возможные линии водородного спектра вплоть до $\lambda = 7000 \text{ \AA}$ (а); б – переходы, отвечающие серии Лаймана (штриховые линии со стрелками) и серии Бальмера (сплошные линии со стрелками)

При очень больших n имеем $h\nu_\infty = 13,6 \cdot (1/4 - 0) = 3,4 \text{ эВ}$;

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{hc}{h\nu} = \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8}{h\nu} = \frac{19,9 \cdot 10^{-26}}{h\nu} [\text{Дж} \cdot \text{м}] = \frac{12,4 \cdot 10^{-7}}{h\nu} \text{ эВ} \cdot \text{м.}$$

Следовательно, $\lambda_1 = 656 \text{ нм}$; $\lambda_2 = 486 \text{ нм}$; $\lambda_3 = 443 \text{ нм}$; $\lambda_4 = 411 \text{ нм}$; $\lambda_\infty = 365 \text{ нм}$.

Спектр содержит бесконечное число линий, сходящихся при $n \rightarrow \infty$ к значению $\lambda_\infty = 3650 \text{ \AA}$, которое отвечает близкой ультрафиолетовой области. Линия λ_1 (6560 \AA) расположена в красной области видимого спектра, λ_2 – в синей, а λ_3 – в фиолетовой. На границу между видимой и ультрафиолетовой областями спектра попадает λ_4 .

4.5.3. Поглощение

Если излучение со сплошным спектром, как, например, излучение нагретого до красного свечения тела, проходит через холодный газ, то находящиеся в основном состоянии атомы газа будут переходить в одно из возбужденных состояний и поглощать при этом фотоны определенной энергии. В случае холодного водорода поглощаться будут фотоны, соответствующие серии Лаймана. Если исследовать сплошной спектр излучения, прошедшего через газ, то в нём обнаружится отсутствие фотонов с энергиями $(E_2 - E_1)$, $(E_3 - E_1)$, $(E_4 - E_1)$ и т. д. Отсутствие фотонов с этими энергиями проявляется на спектрограмме в виде тёмных линий. Процесс, при котором в результате облучения образца вещества светом возбуждаются более высокие энергетические уровни атомов, называется оптической накачкой.

4.6. Вынужденное излучение

В 1916 г. Эйнштейн в рамках квантовой теории теоретически рассмотрел проблему равновесного излучения (п. 2.3), когда при некоторой температуре T вещество находится в термодинамическом равновесии с излучением, заполняющим объем некоторой полости.

Пусть вещество состоит из одинаковых, не взаимодействующих друг с другом атомов. Атомы могут находиться только в двух квантовых состояниях. Состояние с энергией E_1 представляет основное состояние атома. Без внешнего воздействия атом может находиться в этом состоянии неограниченно долго. Состояние атома с энергией E_2 является возбуждённым ($E_2 > E_1$). В него атом переходит, поглощая дополнительную энергию. Пусть причиной возбуждения атома служит поглощение им излучения с частотой ω , удовлетворяющей квантовому условию:

$$\hbar\omega = E_2 - E_1.$$

В рассматриваемой модели излучение в полости будет монохроматическим с частотой ω . Объёмную плотность энергии этого излучения в полости с температурой T обозначим как $u_{\omega,T}$, N_1 — число атомов, находящихся в основном состоянии, N_2 — число возбуждённых атомов, а $N = (N_1 + N_2)$ — общее число атомов. Величины N_1 и N_2 называют за селённостью (населённостью) соответствующих энергетических уровней.

Оба энергетических уровня E_1 и E_2 предполагаются невырожденными. Поэтому в состоянии термодинамического равновесия известная формула Больцмана позволяет записать соотношение между N_1 и N_2 при температуре T в виде

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-\frac{(E_2 - E_1)}{kT}},$$

где k — постоянная Больцмана.

Из этого соотношения следует, что при любой температуре для равновесной системы $N_1 > N_2$. С увеличением температуры разница между N_1 и N_2 уменьшается. При больших температурах ($T \rightarrow \infty$) заселённости обоих уровней будут выравниваться, т. е. $N_1 \rightarrow N_2$.

Атом в возбуждённом состоянии находится в течение очень малого промежутка времени порядка 10^{-8} с (если переход в основное состояние не запрещён правилами отбора). Через такое время даже при отсутствии внешнего воздействия атом самопроизвольно перейдёт в основное состояние, испустив квант излучения $\hbar\omega$. Самопроизвольное излучение возбуждённого атома называется спонтанным излучением (рис. 4.11).

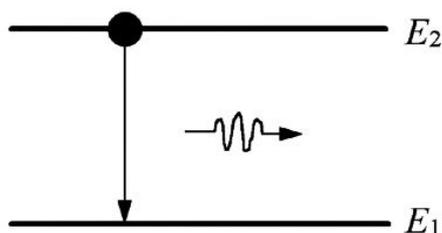


Рис. 4.11. Спонтанные переходы из возбуждённого состояния E_2 в основное E_1 с испусканием фотона, энергией $(E_2 - E_1) = \hbar\omega$

Возбуждённый атом имеет определённую вероятность за единицу времени самопроизвольно, без внешнего воздействия испустить квант энергии. Эта вероятность спонтанного излучения в теории Эйнштейна определяется значением некоторого коэффициента A . В системе в единицу времени будет наблюдаться $Z_{21} = AN_2$ спонтанных переходов атомов из возбуждённого состояния в основное. Величину Z_{21} можно назвать скоростью таких переходов, которые увеличивают энергию излучения за счёт уменьшения энергии вещества.

Спонтанное излучение различных атомов и даже одного атома в различные моменты времени некоррелировано. Оно имеет случайное направление распространения и произвольные плоскость поляризации и фазу. Спонтанное излучение тел деполаризовано и некогерентно, или, точнее, имеет очень малое время когерентности. Такое излучение испускают обычные источники света — лампы накаливания, люминесцентные лампы, нагретые тела, Солнце и др.

Для объяснения равновесия в системе «вещество—излучение» следует учесть также другой процесс (рис. 4.12), когда невозбуждённый атом, поглощая фотон, переходит в возбуждённое состояние.

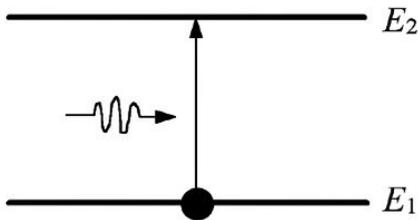


Рис. 4.12. Переход атома из основного состояния E_1 в возбуждённое E_2 при поглощении фотона энергией $(E_2 - E_1) = \hbar\omega$

Вероятность процесса возбуждения в единицу времени определим значением коэффициента B_{12} . Скорость поглощения излучения равна

$$Z_{12} = B_{12} \cdot N_1 \cdot u_{\omega,T}$$

При равновесии в системе «вещество—излучение» скорости рассмотренных процессов равны: $Z_{12} = Z_{21}$ (принцип детального равновесия, см. п. 2.3). В этом случае средние энергии излучения и вещества не будут изменяться со временем. Для равновесного излучения в полости необходимо выполнение условия

$$B_{12} \cdot N_1 \cdot u_{\omega,T} = A N_2$$

Однако Эйнштейн показал, что это условие равновесия не может выполняться при высоких температурах. Записав последнее равенство в виде

$$u_{\omega,T} = \frac{A}{B_{12}} \cdot \frac{N_2}{N_1} = \frac{A}{B_{12}} \cdot e^{-\frac{(E_2 - E_1)}{kT}},$$

получаем, что правая часть равенства при $T \rightarrow \infty$ стремится к конечному пределу A/B_{12} , в то время как плотность энергии равновесного излучения $u_{\omega,T}$ должна неограниченно возрастать с ростом температуры (п. 2.3).

Эйнштейн отметил, что необходимо учесть ещё один процесс — процесс вынужденного или стимулированного излучения. Оно стимулируется (индуцируется) излучением $u_{\omega,T}$, падающим на возбуждённый атом. С вероятностью B_{12} падающее излучение вынуждает атом излучать, и происходит процесс, изображённый на рис. 4.13.

Скорость стимулированного процесса равна

$$Z_{21}' = B_{21} \cdot N_2 \cdot u_{\omega, T}$$

Условие равновесия в системе включает скорости трёх процессов

$$Z_{12} = Z_{21} + Z_{21}'$$

или

$$B_{12} \cdot N_1 \cdot u_{\omega, T} = AN_2 + B_{21} \cdot N_2 \cdot u_{\omega, T}$$

Поскольку при $T \rightarrow \infty$ $N_2 \rightarrow N_1$ и $u_{\omega, T} \rightarrow \infty$, приходим к равенству коэффициентов:

$$B_{12} = B_{21} = B.$$

Осталось определить отношение двух коэффициентов A и B , характеризующих вероятности рассматриваемых в системе процессов взаимодействия излучения и вещества (атомов).

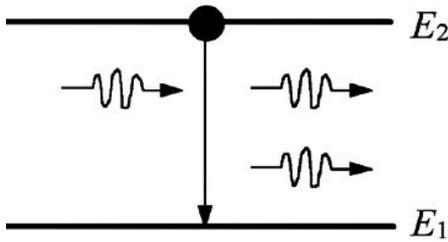


Рис. 4.13. Падающее излучение вынуждает возбуждённый атом излучать кванты вынужденного излучения, неотличимые от первичных стимулирующих квантов. Возникающий в результате вынужденного излучения фотон оказывается точно в фазе с внешним фотоном, стимулировавшим это излучение атома, и летит в том же направлении

Из условия равновесия Эйнштейна следует формула Планка для плотности энергии равновесного излучения. Преобразуем равенство $B \cdot N_1 \cdot u_{\omega, T} = AN_2 + B \cdot N_2 \cdot u_{\omega, T}$ к виду

$$u_{\omega, T} = \frac{A}{B \left(\frac{N_1}{N_2} - 1 \right)} = \frac{A}{B \left[\exp \left(\frac{E_2 - E_1}{kT} \right) - 1 \right]}.$$

Так как $(E_2 - E_1) = \hbar\omega$, то для объёмной плотности энергии излучения получаем

$$u_{\omega, T} = \frac{A}{B} \cdot \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

В классическом пределе ($\hbar \rightarrow 0$) справедлива формула Рэлея–Джинса: $u_{\omega, T} = \omega^2 kT / (\pi^2 c^3)$. Учитывая, что при $\hbar \rightarrow 0$ $\exp(\hbar\omega/kT) \approx 1 + \hbar\omega/kT$, получаем $B = A\pi^2 c^3 / (\hbar\omega^3)$. Подставляя B в выражение для объёмной плотности энергии, получим известную формулу Планка для теплового излучения:

$$u_{\omega, T} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1}.$$

Отметим свойства вынужденного излучения, принципиально отличающие его от спонтанного излучения.

1. Вынужденное излучение распространяется строго в том же направлении, что и излучение, его вызвавшее.
2. Фаза волны вынужденного излучения, испускаемого атомом, точно совпадает с фазой падающей волны.
3. Вынужденное излучение линейно поляризовано с той же плоскостью поляризации, что и падающее излучение.

Кванты вынужденного излучения неотличимы от первичных стимулирующих квантов. При распространении в веществе вынужденное излучение обладает ничтожно малой расходимостью пучка, а также когерентностью и линейной поляризацией волны.

Перечисленные особенности вынужденного излучения являются следствием законов сохранения энергии, импульса и момента импульса (А. Эйнштейн, П. Дирак, 1927 г.).

Среды с инверсной заселённостью уровней. Опыт показывает, что вещество в обычных равновесных условиях поглощает излучение, и по мере распространения излучения в веществе его энергия уменьшается. Это уменьшение энергии излучения в пучке, распространяющемся вдоль направления оси z , описывается законом Бугера с экспоненциальным убыванием интенсивности излучения:

$$I(z) = I_0 \exp(-\mu z).$$

Здесь I_0 — интенсивность излучения на входе в слой вещества; $I(z)$ — его интенсивность излучения в веществе на глубине $z > 0$. Коэффициент μ называется коэффициентом поглощения вещества. Для сред, поглощающих излучение, коэффициент μ положителен (рис. 4.14). Оказывается, возможно создать среду, при распространении в которой электромагнитное излучение будет усиливаться, т. е. существуют среды с отрицательным коэффициентом поглощения (рис. 4.14).

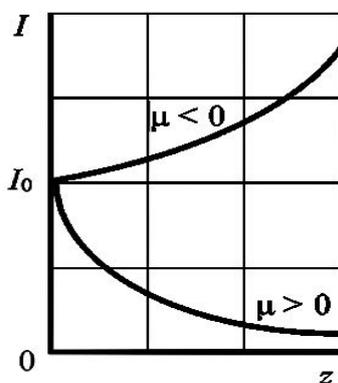


Рис. 4.14. Изменение интенсивности излучения в среде с обычной ($\mu > 0$) и инверсной ($\mu < 0$) заселённостью уровней

Впервые эта идея была высказана профессором Московского энергетического института В.А. Фабрикантом в 1939 г., который показал, что среда может усиливать вынужденное излучение, но такая активная среда должна иметь инверсную заселённость энергетических уровней. Инверсия (от лат. *inversio* – переворачивание, перестановка) заселенностей уровней соответствует заселенности, когда в среде число атомов в возбуждённом состоянии превышает число атомов в основном состоянии ($N_2 > N_1$). Механизм усиления вынужденного излучения при распространении его в активной среде состоит в следующем. Направленный пучок вынужденного излучения встречает на пути распространения атомы вещества. Если такой атом находится в основном состоянии, то он может поглотить квант энергии излучения $\hbar\omega$ (см. рис. 4.12). Если же атом находится в возбуждённом состоянии, то под действием падающего излучения он может вынужденно испустить ещё один точно такой же квант излучения (см. рис. 4.12), увеличивая энергию распространяющегося в веществе излучения на $\hbar\omega$.

Вероятности процессов взаимодействия вынужденного излучения с атомами в любом состоянии одинаковы: $B_{12} = B_{21} = B$. Поэтому при прохождении за время τ достаточно тонкого слоя вещества, содержащего N_1 невозбуждённых атомов и N_2 атомов в возбуждённом состоянии, будет наблюдаться относительное изменение энергии излучения, равное

$$\frac{\Delta u_{\omega, \tau}}{u_{\omega, \tau}} = B\hbar\omega(N_2 - N_1) \cdot \tau.$$

Среда поглощает излучение ($\Delta u_{\omega, \tau} < 0$), если $N_2 < N_1$ и усиливает ($\Delta u_{\omega, \tau} > 0$) при $N_2 > N_1$.

В случае когда энергетические уровни E_1 и E_2 вырождены и кратности их вырождения равны b_1 и b_2 , условие усиления вынужденного излучения имеет вид ^{*)}

$$\frac{N_2}{b_2} > \frac{N_1}{b_1} \quad \text{или} \quad \frac{N_2}{N_1} > \frac{b_2}{b_1}.$$

В равновесном состоянии вещества, как это следует из распределения Больцмана, число атомов в основном состоянии N_1 всегда больше числа атомов N_2 в возбуждённом состоянии. Для создания активной среды с инверсной заселённостью уровней необходимы условия, обес-

^{*)} Вырождение в квантовой теории – существование различных состояний квантовой системы (l, m, m_s), в которых некоторая физическая величина A (например, энергия E) принимает одинаковые значения. В водородоподобных атомах кратность вырождения уровня равна $2n^2$, где $n = 1, 2 \dots$

печивающие генерацию возбуждённых атомов. Некоторые из способов создания сред с инверсной заселённостью уровней будут рассмотрены ниже при обсуждении устройств квантовой электроники.

Иногда активные среды с инверсной заселённостью уровней называют средами с отрицательными температурами. Такое необычное название обусловлено тем, что если в формуле Больцмана формально считать температуру среды отрицательной (!), то при $T < 0$ эта формула даст инверсную заселённость уровней, когда $N_2 > N_1$ для $E_2 > E_1$. Число атомов с большей энергией в среде с отрицательной температурой превосходит число атомов с меньшей энергией.

В качестве классического аналога явления вынужденного излучения можно вновь рассмотреть прикреплённую к пружине заряженную частицу. Пусть коэффициент упругости пружины отвечает частоте собственных колебаний ω_0 . Теперь если эту частицу поместить во внешнее электрическое поле $E = E_0 \cos \omega t$, то она будет совершать колебания с частотой ω и излучать. Чем ближе ω и ω_0 , тем больше амплитуда колебаний. Следует заметить, что частота излучения совпадает не с ω_0 , а с частотой ω внешнего поля.

4.7. Лазер

Квантовые усилители и генераторы. Идея усиления и генерации вынужденного излучения активной средой была реализована в 1955 г. Н.Г. Басовым и А.М. Прохоровым в СССР и в США Ч. Таунсом, Дж. Вебером и др.

В первом приборе квантовой электроники — молекулярном генераторе активной средой служил пучок молекул аммиака NH_3 . Среда с инверсной заселённостью уровней была реализована путем выведения из пучка молекул NH_3 молекул с меньшей энергией, а обогащенный возбуждёнными молекулами пучок представлял собой активную среду.

Сортирующая молекулы по энергиям система представляла квадрупольный конденсатор, состоящий из четырёх параллельных стержней, соединённых попарно с высоковольтным выпрямителем (~30 кВ). Из-за наличия у молекул дипольного электрического момента, ориентация которого по отношению к электрическому полю у невозбуждённых и возбуждённых молекул отличается, неоднородное электрическое поле конденсатора по-разному отклоняло молекулы аммиака, находящиеся в различных энергетических состояниях. Молекулы, находящи-

еся в нижнем энергетическом состоянии, отклонялись в сторону от оси конденсатора и отбрасывались из молекулярного пучка. Молекулы в возбуждённом состоянии отклонялись к оси конденсатора и продолжали двигаться вдоль оси. Отсортированный таким образом молекулярный пучок с повышенной концентрацией возбуждённых молекул направлялся в объёмный резонатор, в который подавалось электромагнитное излучение. Взаимодействуя с молекулярным пучком, вынужденное излучение с частотой $\nu = 24830$ МГц ($\lambda = 1,24$ см) усиливалось. При достаточно большом значении коэффициента усиления в резонаторе наблюдалась генерация таких СВЧ-радиоволн.

Молекулярные квантовые генераторы такого типа получили название *мазеров* — аббревиатура английского выражения *Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation* (усиление микроволн (СВЧ) с помощью вынужденного излучения).

Молекулярные квантовые усилители применяются в качестве входных каскадов радиоприёмных устройств в диапазоне длин волн $\lambda \sim 4...50$ см. Благодаря применению таких усилителей, в СВЧ-диапазоне значительно увеличилась дальность действия радиолокаторов, линий космической связи и радиотелескопов.

Молекулярные квантовые генераторы позволяют измерять частоты колебаний или промежутки времени с наибольшей достижимой в настоящее время точностью (квантовые стандарты частот, атомные часы). Относительная погрешность измерения частоты с помощью таких устройств составляет $10^{-12}...10^{-13}$, а погрешность хода атомных (квантовых) часов не превосходит одну секунду за несколько тысяч лет. Поэтому такие приборы квантовой электроники применяются в службе времени и в системах радионавигации.

Успехи квантовой электроники в радиодиапазоне дали возможность её продвижения в область более коротких длин волн. Возможность усиления и генерации электромагнитного излучения в оптическом диапазоне была обоснована в работах Н.Г. Басова, А.М. Прохорова, Ч. Таунса, А. Шавлова.

В 1960 году был создан (Г. Мейман, США) оптический квантовый генератор, получивший название *лазера* (*Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation* — усиление света с помощью вынужденного излучения). Первый твёрдотельный лазер был рубиновым лазером. Рабочим веществом такого лазера служил монокристалл рубина (корунд Al_2O_3 с примесями ионов хрома Cr^{3+}) в виде цилиндра длиной около 5 см и диаметром порядка 1 см.

Для создания инверсии заселённостей уровней в лазерах наиболее часто используется трёхуровневая схема. Рассмотрим её на примере рубинового лазера.

Энергетический спектр атомов (ионов) содержит три уровня (рис. 4.15) с энергиями E_1 , E_2 и E_3 . Верхний уровень на самом деле представляет собой достаточно широкую полосу, образованную совокупностью близко расположенных уровней.

Главная особенность трёхуровневой системы состоит в том, что уровень 2, расположенный ниже уровня 3, должен быть метастабильным уровнем. Это означает, что переход $2 \rightarrow 1$ в такой системе запрещён законами квантовой механики. Этот запрет связан с нарушением правил отбора квантовых чисел для такого перехода. Правила отбора не являются правилами абсолютного запрета перехода $2 \rightarrow 1$. Однако их нарушение для некоторого квантового перехода значительно уменьшает его вероятность. Попав в такое метастабильное состояние, атом задерживается в нём. При этом время жизни атома в метастабильном состоянии ($\sim 10^{-3}$ с) в сотни тысяч раз превышает время жизни атома в обычном возбуждённом состоянии ($\sim 10^{-8}$ с). Это обеспечивает возможность накопления возбуждённых атомов с энергией E_2 , поэтому на достаточно большое с точки зрения атомных процессов время удаётся создать инверсную заселённость уровней 1 и 2.

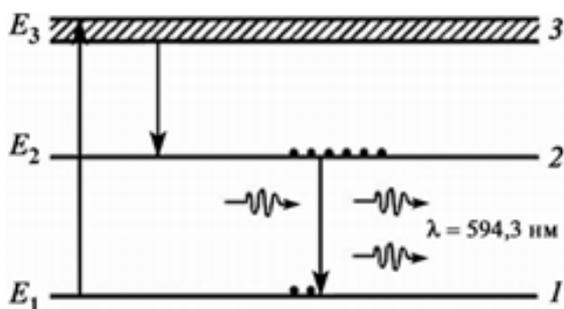


Рис. 4.15. Трёхуровневая схема генерации вынужденного излучения в рубиновом лазере ($Al_2O_3-Cr^{3+}$)

Процесс сообщения энергии рабочему телу лазера для перевода атомов в возбуждённое состояние называют накачкой. Существуют различные физические механизмы накачки. В рубиновом лазере (рис. 4.16) используется импульсная оптическая накачка.

Для этого кристалл рубина P освещается ксеноновой лампой L , работающей в импульсном режиме. Длительность вспышки имеет порядок $\sim 10^{-3}$ с, а мощность накачки в одном импульсе составляет десятки миллионов ватт. За счет прохождения импульса тока через газовый промежуток ксенон нагревается до нескольких тысяч градусов и испускает мощный световой импульс, содержащий оптическое излучение различных длин волн.

Поглощая это излучение, атомы хрома переходят в возбуждённое состояние с энергией E_3 (стрелка $1 \rightarrow 3$ на рис. 4.15). Время жизни таких возбуждённых атомов меньше 10^{-7} с. За это время атомы хрома переходят на более низкий метастабильный энергетический уровень с энергией E_2 . Такой переход $3 \rightarrow 2$ является безызлучательным, т. е. происходит без испускания фотона, а избыток энергии передаётся от атома хрома к кристаллической решетке рубина — в результате кристалл нагревается.

Метастабильность уровня 2 обеспечивает на некоторое время инверсию заселённостей уровней 1 и 2. На это время рубиновый стержень превращается в активную среду, способную усиливать вынужденное излучение с длиной волны $\lambda = 594,3$ нм, соответствующее переходу $2 \rightarrow 1$. Поэтому если в результате спонтанного перехода вблизи левого торца стержня рождается фотон с такой длиной волны, то, взаимодействуя с атомами хрома, он индуцирует новые фотоны, точно копирующие первоначальный. Процесс рождения вынужденных фотонов при распространении в рубине излучения носит лавинообразный характер. В результате вынужденное излучение с длиной волны $\lambda = 594,3$ нм (красный свет), распространяясь вдоль оси рубинового стержня, усиливается.

Для того чтобы такой оптический усилитель превратить в оптический генератор когерентного лазерного излучения, необходимо обеспечить положительную обратную связь, т. е. усиленный пучок излучения снова направить в активную среду. Такую обратную связь обеспечивает оптический резонатор, состоящий из двух строго параллельных плоских зеркал (ЗI и ЗII на рис. 4.16), расположенных вблизи торцов рубинового стержня. Отражающими зеркалами могут служить и хорошо отполированные и посеребрённые торцы самого кристалла.

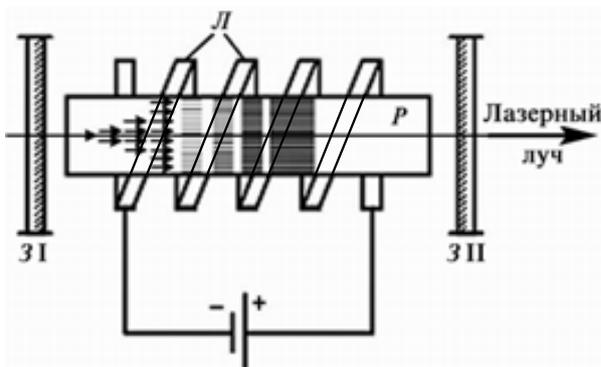


Рис. 4.16. Схема рубинового лазера: P — монокристалл рубина, активированный ионами хрома (Cr^{3+}); L — импульсная ксеноновая лампа; ЗI и ЗII — строго параллельные плоские зеркала (зеркало ЗII полупрозрачное)

В обычном свободном режиме генерации одно из зеркал, например ЗII, делается полупрозрачным. Поэтому после многократного отражения от зеркал и усиления лазерный пучок становится достаточно интенсивным и получает возможность выхода через полупрозрачное зеркало. Затем следует новая вспышка лампы накачки и процесс повторяется.

В режиме генерации гигантских импульсов одно из зеркал закрывается оптическим затвором. Задерживая генерацию, такой затвор позволяет увеличить инверсию заселённости уровней и накопить энергию активной среды. При открытии затвора создаются условия быстрого развития генерации, которая реализуется в виде короткого (около 20...50 нс) мощного (гигантского) импульса с энергией от 1 до 100 Дж, что соответствует мощности более 10^{10} Вт.

Лазер на рубине работает в импульсном режиме с частотой порядка нескольких импульсов в минуту. Для отвода тепла рубиновый лазер приходится охлаждать с помощью жидкого воздуха.

К настоящему времени обнаружены сотни кристаллов с примесями, которые можно использовать в качестве активных сред в твёрдотельных лазерах. Созданы лазеры на иттриево-алюминиевом гранате, александрите, стекле с примесью неодима и других материалах.

В 1961 г. был создан первый газовый гелий-неоновый лазер (А. Джаван). В таком лазере инверсия заселённости уровней атомов неона создаётся за счёт электрического разряда в смеси газов He и Ne.

Гелий-неоновый газовый лазер работает в непрерывном режиме генерации, испуская когерентное излучение с длиной волны $\lambda = 638,2$ нм. Мощность такого лазера достигает всего десятых долей ватт при КПД 0,1%. Оптимальным с точки зрения генерируемой мощности является диаметр газоразрядной трубки около 7 мм при давлении газовой смеси 130 Па и соотношении He и Ne в ней 1:10.

На рис. 4.17 приведена схема такого процесса для случая гелий-неонового лазера; в состоянии E_k находится больше атомов, чем в состоянии E_n .

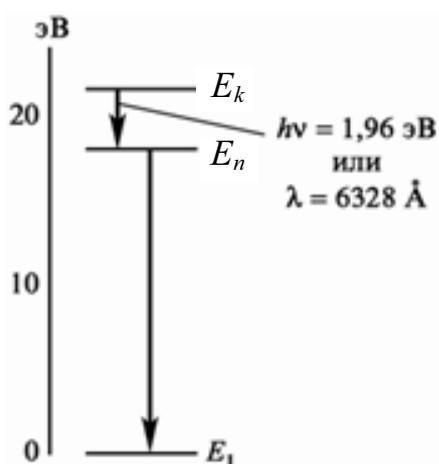


Рис. 4.17. Три энергетических уровня атома неона. В гелий-неоновом лазере атомы неона переходят в возбуждённое состояние E_k вследствие столкновений с возбуждёнными атомами гелия. Переход в состояние E_n обуславливается вынужденным излучением. Затем, благодаря столкновениям со стенками, атомы неона быстро переходят в основное состояние

Наиболее мощными газовыми лазерами являются молекулярные лазеры. Так, например, в газоразрядных CO_2 -лазерах электроны в тлею-

шем разряде возбуждают колебательные уровни молекул CO_2 и N_2 . В мощных CO_2 -лазерах используется непрерывная прокачка газа. Быстропроточные CO_2 -лазеры генерируют излучение с длинами волн, равными 9,4 и 10,6 мкм мощностью в десятки киловатт при КПД порядка 20 %.

В молекулярных газовых лазерах для создания инверсии заселённости уровней, кроме электрического разряда, могут использоваться и другие методы. Так, например, в газодинамических лазерах активная среда создаётся при адиабатическом охлаждении газовых масс. При расширении нагретого газа в сверхзвуковом сопле газ быстро охлаждается. В таких условиях быстрее теряют энергию молекулы газа, находящиеся в состояниях с меньшей энергией. Это приводит к инверсии заселённости энергетических уровней молекул CO_2 , NO_2 и CS_2 . Газодинамические лазеры в непрерывном режиме генерируют мощности до сотен кВт.

Возможно создание газовых лазеров, в которых инверсия заселённости энергетических уровней образуется при протекании химических реакций в объёме активной среды. Большинство химических лазеров работают на колебательных переходах двухатомных молекул.

Наиболее мощные химические лазеры на основе цепной реакции фтора с водородом обладают выходной мощностью в несколько киловатт и КПД 2...4 %.

Н.Г. Басовым были предложены лазеры на основе *p-n*-переходов в полупроводниковых материалах. Впервые такой полупроводниковый лазер был изготовлен на основе полупроводникового кристалла арсенида галлия GaAs. В качестве накачки в таких лазерах используется инжекция электронов через *p-n*-переход либо его электрической пробой. Особенности полупроводниковых лазеров являются их компактность (размер в несколько миллиметров), высокий КПД (до 50 %), возможность перестройки частоты генерации в широком спектральном диапазоне от 0,3 до 30 мкм.

Приборы квантовой электроники – мазеры и лазеры нашли многообразные области применения. Они произвели настоящую революцию в конце XX столетия в физике, технике, технологиях. Отметим только некоторые области применения приборов квантовой электроники.

Сварка, резка и плавление металлов осуществляются с помощью газовых лазеров. Лазеры применяются в медицине как бескровные скальпели. Когерентное излучение лазеров лечит глазные, кожные и другие болезни. Сверхкороткие лазерные импульсы нашли применение в оптических линиях связи. Сверхстабильные мазеры и лазеры являются основой стандартов частот и времени. Лазерные локаторы по-

зволяют контролировать распределение загрязнений в атмосфере. Лазерная локация космических объектов способствовала созданию систем космической навигации, позволила уточнить характеристики движения планет. Лазерные лучи используются и для управления движением ракет. При облучении мишеней излучением мощных лазеров получена высокотемпературная ($\sim 10^7$ К) плазма. Таким способом может быть решена проблема управляемого термоядерного синтеза. И это далеко не полный перечень применения квантовой электроники.

С появлением лазеров связано зарождение новых разделов физики: голографии, нелинейной оптики, квантовых компьютеров и др. Физики обсуждают возможные применения рентгеновских лазеров, схемы которых прорабатываются уже сейчас в физических лабораториях. А ведь можно в рамках научной фантастики предсказать и существование космических гамма-лазеров.

Бурное развитие квантовой электроники базируется на идеях, высказанных еще в первых работах Н.Г. Басова, А.М. Прохорова и Ч. Таунса. Этим ученым за фундаментальные исследования в области квантовой электроники в 1964 г. была присуждена Нобелевская премия по физике.

4.8. Модель атома Бора



Нильс Бор

Квантовая модель атома, рассматриваемая в данном параграфе, была создана в 1926 г. после появления уравнения Шрёдингера. За тринадцать лет до этого Нильс Бор создал полуклассическую теорию, которая полностью объясняла весь спектр водорода и легла в основу физической модели устойчивого атома.

Хотя теория Бора устарела, историческое значение так велико, что мы изложим её здесь. Кстати, символы боровской теории употребляются и по сей день (рис. 4.18). Бор считал, что возможные орбиты электронов аналогичны классическим круговым орбитам планет, и пытался найти правило, которое допускало бы лишь определённые значения энергий электрона или радиусов орбит. Он придумал правило, согласно которому численное значение момента импульса должно быть целым кратным постоянной \hbar — поскольку на

орбите укладывается целое число n длин волн де Бройля ($2\pi r = n\lambda_B$, $\lambda_B = 2\pi\hbar/mv$):

$$Mvr = n\hbar.$$

Боровский постулат отличается от современных представлений о свойствах атома водорода в двух отношениях. Во-первых, понятие классической орбиты теряет смысл применительно к электрону, состояние которого характеризуется стоячей волной. Во-вторых, момент импульса равен не $n\hbar$, а $l\hbar$ — он меньше боровского значения. Таким образом, то обстоятельство, что теория Бора правильно описывает спектр энергетических уровней атома водорода, является счастливой случайностью. В том, что правильный ответ может оказаться следствием неправильных рассуждений, нет ничего необычного (закон Видемана—Франца).

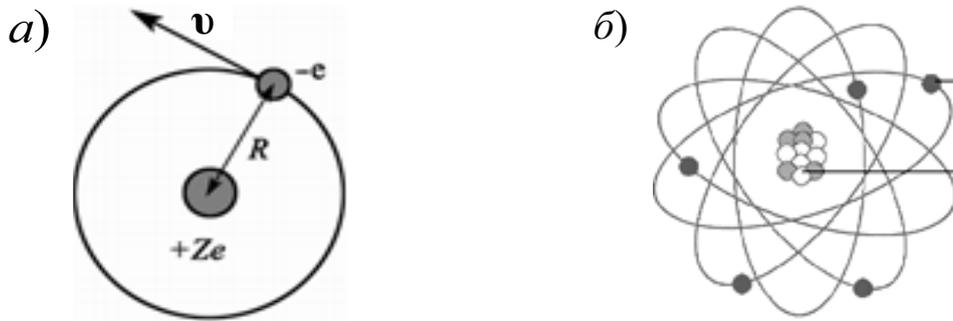


Рис. 4.18. Модель Бора водородоподобного атома (а); б — традиционный символ атома

Найдем энергетические уровни электрона в поле ядра с зарядом Ze . Согласно постулату Бора, радиус n -орбиты равен:

$$r_n = n \frac{\hbar}{mv}.$$

Уравнение движения электрона в центрально-симметричном поле ядра получим из второго закона Ньютона:

$$\frac{mv^2}{r_n} = \frac{k_0 Ze^2}{r_n^2};$$

$$mv^2 = \frac{k_0 Ze^2}{r_n} = -U \text{ (потенциальная энергия);}$$

$$v^2 = \frac{k_0 Ze^2}{mr_n}.$$

Подставляя в v^2 выражение для r_n , получаем

$$v^2 = \frac{k_0 Z e^2}{m \left(n \frac{\hbar}{m v} \right)}; \quad v = \frac{k_0 Z e^2}{n \hbar}.$$

Энергии уровней определяются соотношением

$$E_n = (1/2) m v^2 + U,$$

или (после замены $U = -m v^2$)

$$E_n = \frac{1}{2} m v^2 + (-m v^2) = -\frac{1}{2} m v^2.$$

Возводя в квадрат правую часть выражения для v , находим

$$E_n = -k_0^2 \frac{Z^2 m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -13,6 \cdot \left(\frac{Z^2}{n^2} \right) \text{ эВ}.$$

Эту величину можно также выразить через r , подставив v^2 в выражение $E = -(1/2) m v^2$, что даёт

$$E_n = -\frac{k_0 Z e^2}{2 r_n}.$$

Соотношение для E_n следует и из современной квантовой теории. В модели Бора содержится также простой ответ на вопрос о размерах атома. Формулу для r_n получаем подстановкой выражения для v :

$$r_n = n^2 \frac{\hbar^2}{k_0 Z m e^2}.$$

Величина r_n совпадает со средним радиусом электронного облака (см. рис. 4.4).

Серьёзным недостатком модели Бора является то, что она неспособна объяснить спектры атомов начиная с атома гелия, вокруг ядра которого ($Z = 2$) вращаются два электрона. Несмотря на сложность проблемы трёх взаимодействующих частиц, квантовая механика позволяет рассчитать энергетические уровни атома гелия. На основании современной теории с помощью компьютеров спектр гелия просчитан с высокой точностью. Данные эксперимента подтвердили результаты этих расчетов. Современная квантовая механика в принципе способна описать все спектры атомов и свойства химических соединений.

Рассмотрим, как изменится частота излучения атома водорода с учётом конечной величины массы ядра.

Электрон и ядро вращаются вокруг неподвижного центра масс. Обозначим через r_e и $r_{\text{я}}$ радиусы круговых орбит электрона и ядра. По определению центра масс $mr_e = Mr_{\text{я}}$, где m и M – массы электрона и ядра.

Угловые скорости вращения электрона и ядра вокруг неподвижного центра масс равны, следовательно,

$$\omega = \frac{v_e}{r_e} = \frac{v_{\text{я}}}{r_{\text{я}}},$$

где v_e и $v_{\text{я}}$ – скорости электрона и ядра, соответственно.

С учётом движения ядра момент импульса атома

$$L = mv_e r_e + Mv_{\text{я}} r_{\text{я}} = m\omega r_e^2 + M\omega r_{\text{я}}^2.$$

В качестве основных уравнений теории запишем условие вращения электрона по круговой орбите и условие Бора – квантование момента импульса атома:

$$\begin{cases} m\omega^2 r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r_e + r_{\text{я}})^2}, \\ m\omega r_e^2 + M\omega r_{\text{я}}^2 = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Обозначим через $r = (r_e + r_{\text{я}}) = r_e(1 + m/M)$ расстояние между электроном и ядром и перепишем полученные соотношения в виде

$$\begin{cases} \mu\omega^2 r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \\ \mu\omega r^2 = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \end{cases}$$

Здесь введена приведённая масса системы «электрон–ядро»

$$\mu = \frac{mM}{m + M}.$$

Решая полученную систему уравнений, находим для стационарных состояний атома ($n = 1, 2, \dots$)

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{\mu e^2} \quad \text{и} \quad \omega_n = \frac{\mu e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3 n^3}.$$

Полная энергия атома

$$E = \frac{mv_e^2}{2} + \frac{Mv_{\text{я}}^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (r_e + r_{\text{я}})} = \frac{\mu\omega^2 r^2}{2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Подставив сюда значения r_n и ω_n , получим для энергии атома

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Частоты спектральных линий излучения атома при переходе с уровня k на уровень n равны

$$\nu_{nk} = \frac{E_k - E_n}{h} = R_M \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right),$$

где R_M – модифицированная постоянная Ридберга R_∞^* :

$$R_M = \frac{\mu e^4}{64\pi^3 \varepsilon_0^2 \hbar^3} = \frac{m e^4}{64\pi^3 \varepsilon_0^2 \hbar^3} \cdot \frac{1}{1 + m/M} = \frac{R_\infty}{1 + m/M}.$$

Поправка частоты (длины волны) излучения атома водорода за счёт учёта движения ядра составляет доли процента. Однако благодаря чрезвычайной точности спектроскопических методов, удаётся экспериментально обнаружить различие в спектрах излучения изотопов водорода – атомов, отличающихся массами ядер. Именно спектроскопическими методами был открыт изотоп тяжёлого водорода – дейтерий D, для которого $M_D = 2M_H$.

Покажем, что полученное в теории Бора значение радиуса ($r_n = n^2 a$) согласуется с расчётами на основе волновых функций атома водорода при $l = (n - 1)$. Определим «средний» радиус как расстояние, на котором распределение вероятностей достигает максимума.

Распределение вероятности найти электрон в шаровом слое единичной ширины равно

$$|\psi_{n,n-1}|^2 dV = 4\pi r^2 |R_{n,n-1}(r)|^2 dr,$$

где $R_{n,n-1}$ – радиальная волновая функция в атоме водорода.

Используя табл. 4.2, можно написать, что

$$(R_{n,n-1})^2 \sim r^{2n-2} e^{-2r/na}.$$

Обозначим распределение вероятностей через $P(r)$:

$$P(r) = r^{2n} e^{-2r/na}.$$

Эта функция имеет максимум, когда $dP/dr = 0$:

$$\frac{dP}{dr} = 2nr^{2n-1} e^{-2r/na} - \frac{2}{na} r^{2n} e^{-2r/na} = 0.$$

^{*)} Постоянная Ридберга – фундаментальная физическая константа, входящая в выражения для расчёта уровней энергии и частот излучения атома. Введена шведским физиком Ю.Р. Ридбергом (*J.R. Rydberg*) в 1890 г. Если принять, что масса атомного ядра бесконечно велика по сравнению с массой электрона (ядро неподвижно), то $R_\infty = 10973731,534(13) \text{ м}^{-1}$ (на 1986 г.), $R_\infty ch = 13,6056981(40) \text{ эВ}$.

Сократив экспоненты, получим

$$nr^{2n-1} - \frac{1}{na} r^{2n} = 0; \quad n^2 ar^{2n-1} = r^{2n};$$

$$r = n^2 a.$$

Здесь $a = r_1 = \hbar^2/(k_0 m e^2)$ – первый боровский радиус. Полученный результат справедлив для любых целых значений n , включая $n = 1$, соответствующего волновой функции основного состояния.

4.9. Стабильность орбит

Используя теорию Бора и формулу для излучения точечного заряда, можно вычислить время, за которое совершается переход с орбиты радиусом r_k на орбиту радиусом r_n . Скорость потери энергии для заряда, двигающегося с ускорением a :

$$-\frac{dE}{dt} = \frac{2}{3} k_0 \frac{e^2}{c^3} a^2, \quad \text{где} \quad a = \frac{F}{m} = k_0 \frac{e^2}{mr^2};$$

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} k_0^3 \frac{e^6}{m^2 c^3 r^4}.$$

Величину dE/dr найдём, дифференцируя выражение

$$E = -k_0 \frac{e^2}{2r},$$

откуда

$$\frac{dE}{dr} = k_0 \frac{e^2}{2r^2}.$$

Теперь вычислим dt/dr :

$$\frac{dt}{dr} = \left(\frac{dt}{dE} \right) \frac{dE}{dr}.$$

С учетом dE/dt и dE/dr получаем

$$\frac{dt}{dr} = \left(-\frac{2}{3} k_0^3 \frac{e^6}{m^2 c^3 r^4} \right)^{-1} \left(k_0 \frac{e^2}{2r^2} \right) = -\frac{3}{4} \frac{m^2 c^3 r^2}{k_0^2 e^4}.$$

Время перехода определяется формулой:

$$\tau = \int_{R_k}^{R_n} \frac{dt}{dr} dr = \int_{R_k}^{R_n} \left(-\frac{3}{4} \frac{m^2 c^3 r^2}{k_0^2 e^4} \right) dr = \frac{m^2 c^3}{4k_0^2 e^4} (r_k^3 - r_n^3).$$

Для первой линии серии Бальмера $r_k = r_3 = 0,477 \text{ нм} = 4,77 \cdot 10^{-10} \text{ м}$, а $r_n = r_2 = 0,212 \text{ нм} = 2,12 \cdot 10^{-10} \text{ м}$. Таким образом,

$$\tau = \frac{(9,11 \cdot 10^{-31})^2 \cdot (3 \cdot 10^8)^3}{4 \cdot (9 \cdot 10^9)^2 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^4} \cdot [(4,77 \cdot 10^{-10})^3 - (2,12 \cdot 10^{-10})^3] \approx 1 \cdot 10^{-8} \text{ с.}$$

Этот результат хорошо согласуется с точным квантово-механическим расчётом, в котором не используется классическая физика.

Применяя формулу для времени излучения, вычислим время, за которое электрон атома водорода, находящегося в основном состоянии в модели Бора, упадёт на протон. Радиус протона $r_p = 10^{-15} \text{ м}$. Положим в выражении для τ $r_k = r_1 = 0,53 \cdot 10^{-10} \text{ м}$ (начальный радиус) и $r_p = 10^{-15} \text{ м}$ (конечный радиус) и учитывая, что $r_p \ll r_1$, тогда получим

$$\tau = \frac{m^2 c^3}{4k_0^2 e^4} r_1^3 = \frac{(9,11 \cdot 10^{-31})^2 \cdot (3 \cdot 10^8)^3}{4 \cdot (9 \cdot 10^9)^2 \cdot (1,6 \cdot 10^{-19})^4} \cdot (0,53 \cdot 10^{-10})^3 \approx 1,6 \cdot 10^{-11} \text{ с.}$$

Это означает, что если бы электрон на боровской орбите, отвечающей основному состоянию, излучал в соответствии с классической физикой, то атомы водорода испытывали бы коллапс за время 10^{-11} с . Бор нашёл выход из этого затруднения, постулировав, что электроны в основном состоянии не излучают.

Основные выводы

Уравнение Шрёдингера в трёх измерениях записывается следующим образом:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi.$$

В случае, когда $\psi(x, y, z)$ зависит только от r , это уравнение принимает вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi}{dr} \right) = -\frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi.$$

В случае атома водорода $U = -k_0 e^2 / r$. При этом решением, соответствующим состоянию с низшей энергией $E_1 = -k_0^2 m e^4 / (2\hbar^2) = -13,6 \text{ эВ}$, является функция $\psi_1 = \exp(-r/a)$, где $a = \hbar^2 / (k_0 m e^2)$ – радиус.

Собственные значения энергии для n -состояния $E_n = -13,6/n^2 \text{ эВ}$. Соответствующие им решения могут зависеть от углов θ и φ . Зависимость волновой функции от угла φ имеет вид $\exp(im\varphi)$. При этом проекция момента импульса на ось z кратна постоянной Планка \hbar : $L_z = m\hbar$, где

m_l — магнитное квантовое число. Зависимость от угла θ характеризуется значением орбитального квантового числа l , причем $(L_z)_{\max} = \hbar l$ — максимальное значение величины L_z ; m_l может быть любым целым числом в пределах от $-l$ до $+l$. Квантовое число l может принимать целочисленные значения от 0 до $(n - 1)$.

При $k > n$ возможен спонтанный переход с уровня E_k на уровень E_n , сопровождающийся испусканием фотона. Энергия фотона $h\nu = E_k - E_n$. Если фотон с такой частотой ν сталкивается с атомом в состоянии E_n , то фотон может поглотиться, а атом при этом перейдет из начального состояния E_n в возбужденное состояние E_k . Если газообразный водород нагрет и часть атомов находится в возбужденных состояниях с более высокой энергией, то энергии фотонов в спектре излучения запишутся в виде

$$h\nu = 13,6 \cdot \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{k^2} \right) \text{ эВ.}$$

Фотон может стимулировать возбужденные атомы испускать кванты с той же частотой и фазой. Таким образом, совокупность атомов, находящихся в подходящем возбужденном состоянии (с инверсной заселенностью уровней), позволяет получить пучок когерентного света. На этом принципе основано действие лазера.

Модель Бора позволяет определить значения энергетических уровней и радиусов орбит атома водорода. В её основе лежит гипотеза, что электрон движется по классической орбите, для которой $mvr = n\hbar$, и в атоме существуют стационарные (не изменяющиеся со временем) состояния, в которых он не излучает энергию.

Упражнения

1. Повторите вывод формулы $r_0 \approx \frac{h^2 n^2}{32k_0 m e^2} = \frac{4\pi^2}{32} \frac{\hbar^2}{k_0 m e^2} n^2$ для электрона в поле ядра с зарядом Ze .
2. Допустим, что электрон покоится у поверхности ядра урана ($Z = 92$). Какую энергию надо затратить, чтобы удалить электрон на бесконечность, если радиус ядра составляет $5,5 \cdot 10^{-15}$ м?
3. Электрон находится в ящике кубической формы. Если L увеличить на 1 %, то площадь поверхности ящика возрастёт примерно на 2 %, а объём — на 3 %. Как изменятся энергии уровней, отвечающих стоячим волнам (в процентах)?

4. Положите в уравнении

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi$$

$U = -k_0 Z e^2 / r$ и попытайтесь отыскать решение в виде $\psi_1 = e^{-r/a}$. Какие в этом случае получатся значения a и E ?

5. Сколько будет различных волновых функций в случае $n = 5$?
6. Какая минимальная энергия может быть поглощена атомом водорода в основном состоянии?
7. Чему равен боровский радиус He^+ в основном состоянии?
8. Найдите для основного состояния атома водорода в боровской модели (в электронвольтах): а) кинетическую энергию; б) потенциальную энергию; в) энергию связи; г) энергию, необходимую для удаления на бесконечность электрона, который находится от протона на расстоянии боровского радиуса.
9. Атомы газообразного водорода находятся в состоянии с $n = 5$. Сколько всего линий будет в спектре излучения этого газа?
10. В спектре поглощения элемента X наблюдаются следующие три линии: $\nu_1 = 2,2 \cdot 10^{15}$ Гц, $\nu_2 = 3,0 \cdot 10^{15}$ Гц и $\nu_3 = 3,5 \cdot 10^{15}$ Гц.
 - а) Будут ли эти линии присутствовать в спектре излучения этого элемента?
 - б) Перечислите частоты трёх других линий в спектре излучения.
11. В спектре He^+ найдите линию с той же длиной волны, что и в спектре водорода. Чему равна эта длина волны?
12. Мю-мезоатом состоит из ядра с зарядом Z и мюона (частица в 207 раз тяжелее электрона в основном состоянии). Определить: 1) чему равна энергия связи отрицательного мюона (μ^-), захваченного протоном; 2) чему равен соответствующий радиус боровской орбиты с $n = 1$; 3) с какой энергией испускается фотон при переходе из состояния с $n = 2$ в основное состояние?
13. Напишите в явном виде волновую функцию $\psi_{3,2,-2}(r, \theta, \phi)$ для водорода.
14. Проведите нормировку волновой функции с $n = 1$, т. е. запишите $\psi = C e^{-r/a}$, а затем вычислите $\int \psi^* \psi dV = 1$ или $C^2 \int e^{-2r/a} dV = 1$ и определите C .
15. Используя формулу

$$\tau = \int_{R_k}^{R_n} \frac{dt}{dr} dr = \int_{R_k}^{R_n} \left(-\frac{3}{4} \frac{m^2 c^3 r^2}{k_0^2 e^4} \right) dr = \frac{m^2 c^3}{4 k_0^2 e^4} (r_k^3 - r_n^3),$$

вычислите время перехода из состояния с $k = 4$ в состояние с $n = 3$.

16. Определите длины волн, соответствующие первым четырём линиям в спектре поглощения водорода.
17. Второй ионизационный потенциал гелия (численно равный энергии в электронвольтах, необходимый для удаления оставшегося электрона из иона He^+) может быть точно вычислен из первого ионизационного потенциала водорода. Почему нельзя аналогично вычислить второй ионизационный потенциал лития (75,6 эВ), исходя из первого ионизационного потенциала гелия?

Задачи

1. Рассмотрим электрон, находящийся в трёхмерном кубическом ящике размером $L = 10^{-10}$ м. Чему равны энергии (в эВ) четырёх низших уровней? Сколько состояний отвечает каждому энергетическому уровню? Напишите волновые функции для каждого состояния.
2. Ящик имеет размеры $L_y = L_z = 2L_x$. Выразите энергии трёх низших уровней через n_x, n_y, n_z, m, \hbar и L_x . Напишите соответствующие собственные функции. Заметьте, что второму энергетическому уровню отвечают две различные собственные функции.

3. Подстановкой в уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi$$

покажите, что функция $\psi(r, \theta, \varphi) = (re^{-r/2a})(\sin \theta)(e^{i\varphi})$ является решением для атома водорода. Какие получатся при этом значения a и E ?

4. Подстановкой в уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \psi$$

покажите, что функция $\psi_{(2)} = \left(1 - \frac{2r}{3a} + \frac{2r^2}{27a^2} \right) e^{-r/3a}$ также является решением в случае атома водорода.

5. Найдите среднее значение функции $1/r$ в основном состоянии ато-

ма водорода, принимая во внимание, что $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{\int \frac{1}{r} \psi^* \psi dV}{\int \psi^* \psi dV}$.

6. С помощью соотношения

$$\tau = \int_{R_k}^{R_n} \frac{dt}{dr} dr = \int_{R_k}^{R_n} \left(-\frac{3}{4} \frac{m^2 c^3 r^2}{k_0^2 e^4} \right) dr = \frac{m^2 c^3}{4k_0^2 e^4} (r_k^3 - r_n^3)$$

вычислите время перехода из состояния с $k = 4$ в состояние с $n = 3$.

- Чему равно отношение $\Delta\lambda/\lambda$ для этой спектральной линии? Каким должно быть расстояние между штрихами дифракционной решетки длиной 5 см, чтобы она могла разрешить естественную ширину линии?
7. Используя боровскую модель, вычислите радиус орбиты, по которой электрон движется вокруг нейтрона.
 8. Легкая частица массой m и положительным зарядом q движется по круговой орбите радиусом r вокруг тяжелой частицы, имеющей массу M и заряд $-Q$. Пусть между этими частицами действуют лишь электростатические силы.
 - а) Найдите выражение для потенциальной энергии заряда q через его массу m и скорость v .
 - б) Чему равна полная энергия E в зависимости от m и v ?
 - в) Используя постулат Бора о квантовании момента импульса, найдите выражение для v через r , m , \hbar и n .
 - г) Запишите квантованные радиус r и энергию E через m , \hbar , Q , q и n .
 9. Рассмотрим воображаемый элемент X, атомы которого имеют валентность +1. Пусть энергия связи внешнего электрона равна 3,2 эВ. Известно также, что энергии трёх возбуждённых уровней этого электрона составляют -1 , 0 , $-1,4$ и $-2,0$ эВ.
 - а) Какова энергия основного состояния (в эВ)?
 - б) Перечислите все линии в спектре излучения этого элемента. Найдите энергии соответствующих фотонов (в эВ).
 10. а) Какова вероятность того, что в атоме водорода электрон находится в области $r > a$, где a – радиус орбиты Бора?
 б) Какова вероятность того, что электрон находится в области $r < 10^{-15}$ м (протон следует считать точечным зарядом. Это приводит к правильному значению вероятности обнаружить электрон внутри протона)?
 11. Предположим, что ψ является функцией только от r . Пусть $u(r) \equiv r\psi$. Напишите радиальное уравнение Шрёдингера в трёх измерениях для функции u .
 12. Вычислите второй ионизационный потенциал гелия (численно равный энергии в электронвольтах, необходимый для удаления оставшегося электрона из иона He^+). Ответ: $E_{\text{ион2}} = 54,4$ эВ.
 13. Вычислите третий ионизационный потенциал лития (энергия, необходимая для удаления оставшегося электрона из иона Li^{++}). Ответ: $E_{\text{ион3}} = 122,4$ эВ.
 14. Вычислите относительное число атомов водорода в основном состоянии и в первом возбуждённом состоянии для газа, находящегося в тепловом равновесии при температуре 3000 К. Ответ: $N_2/N_1 = 3 \cdot 10^{-17}$.

5. АТОМНАЯ ФИЗИКА

5.1. Принцип запрета Паули



Вольфганг Паули

Согласно периодической системе элементов Д.И. Менделеева (см. табл. 5.2) и рис. 5.1, повторения химических и физических свойств элементов образуют последовательность чисел 2, 8, 8, 18, 18, 32. В 1925 году Вольфганг Паули (1900–1958) предложил правило, которое автоматически объясняло наличие групп из 2, 8, 18 и 32 элементов. Он постулировал, что одну электронную орбиталь, или стоячую волну могут занимать не более двух электронов. Следовательно, в состоянии с $n = 1$ могут находиться два электрона. Состоянию с $n = 2$ отвечают 4 орбитали: $(n, l, m_l) = (2, 0, 0), (2, 1, 1), (2, 1, 0)$ и $(2, 1, -1)$. Таким образом, в состоянии с $n = 2$ могут находиться 8 электронов. И так, мы получили числа 2 и 8. Число 18 можно получить, сложив 5 орбиталей с $l = 2$ и 4 орбитали с $l = 0$ и 1. Эти девять орбиталей могут быть заняты 18 электронами.

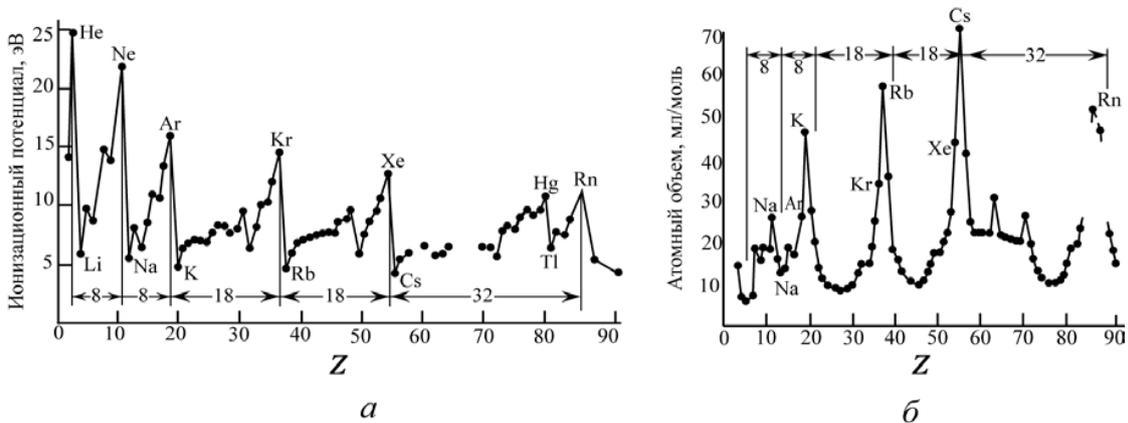


Рис. 5.1. Зависимость ионизационного потенциала элементов от атомного номера Z (а); б – зависимость атомного объёма от Z

Мы видим, что числа 2, 8 и 18 являются прямым следствием принципа запрета, а также квантово-механического правила, согласно которому $-l \leq m_l \leq +l$ и $0 \leq l \leq (n - 1)$. В п. 5.3 мы объясним, почему «оболочки» с 8 и 18 электронами повторяются. В момент своего возникновения принцип Паули явился новым постулатом, который в то время нельзя было вывести из общих положений.

Спин электрона. Годом позже было обнаружено, что у каждого электрона имеется собственный момент импульса, или спин, равный $L_{\text{соб}} = \hbar/2$. Он составляет половину обычного значения орбитального момента. Это похоже на то, как если бы электрон представлял собой сферу, вращающуюся вокруг собственной оси с постоянным моментом $\hbar/2$. Этот собственный момент, или спин, невозможно ни уменьшить, ни увеличить. Он одинаков у всех элементарных частиц данного типа.

Вскоре после того как был открыт спин электрона, Паули и Дирак разработали релятивистскую теорию частиц со спином $1/2$ и обнаружили, что условие релятивистской инвариантности приводит к волновым функциям электрона, которые автоматически удовлетворяют принципу запрета Паули. У частицы со спином $1/2$ проекции её спина на ось z могут принимать лишь одно из двух значений $(+1/2)\hbar$ или $(-1/2)\hbar$. Величина проекции спина необходима для полной характеристики состояния электрона. Если состояние электрона задано таким образом, то принцип запрета утверждает, что в данном квантовом состоянии может находиться не более одного электрона. Поскольку при данном орбитальном числе возможны две ориентации спина, то равнозначна следующая формулировка принципа Паули: на данной орбитали может находиться не более двух электронов.

5.2. Многоэлектронные атомы

Используя уравнение Шрёдингера и принцип Паули, можно «рассчитать» свойства всех элементов, не обращаясь к результатам химических опытов. В 1929 году Дирак сказал: «Все фундаментальные физические законы, необходимые для построения математической теории большей части физики и всей химии, уже известны». К настоящему времени рассчитаны электронные плотности и энергии связи более тяжёлых, чем водород, атомов. Стало возможным вычислять скорости химических реакций и изучать структуру молекулярной связи, как это иллюстрируется рис. 5.2. Вместе с тем для большинства относящихся к

химии задач использование вычислительных машин нецелесообразно — гораздо легче провести непосредственные измерения.

Принцип Паули позволяет определить положение каждого электрона в атоме. Рассмотрим, например, лишённое электронов ядро неона ($Z = 10$). Если оно приобретает один электрон, то последний быстро переходит на орбиталь с $n = 1$. То же справедливо и для второго электрона. Оба этих электрона целиком заполняют орбиталь с $n = 1$. Если теперь добавить остальные восемь электронов, то они целиком заполнят четыре возможные орбитали с $n = 2$: $(l, m_l) = (0,0), (1,1), (1,0), (1, -1)$.

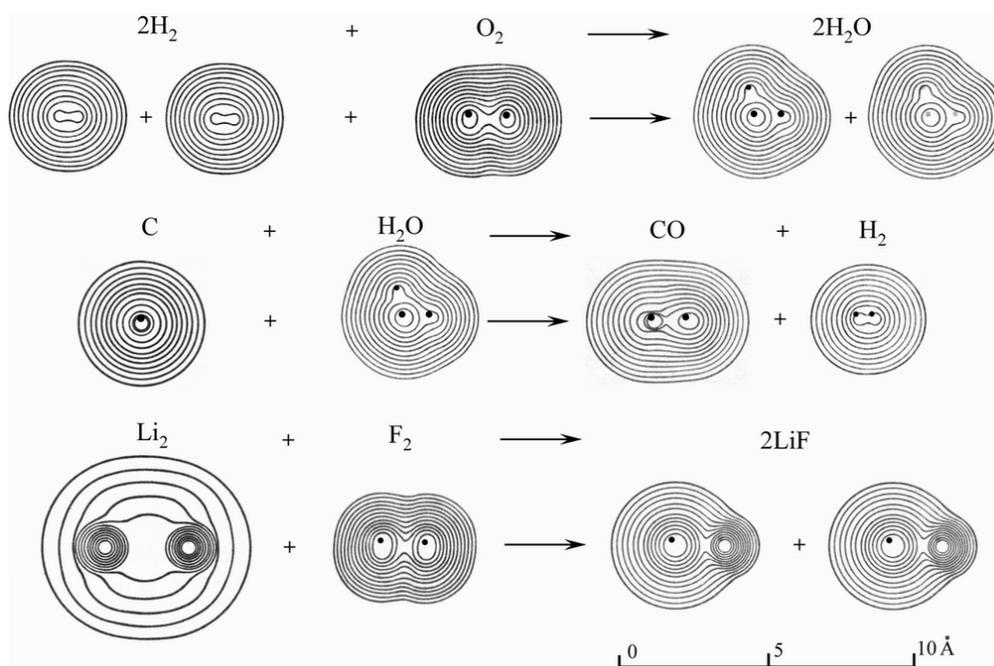


Рис. 5.2. Три различные химические реакции. На каждом последующем контуре плотность электронов уменьшается вдвое. Промежуточные стадии химической реакции представлены на рис. 5.5

Рассмотрим структуры атомов, начиная с водорода, на основе квантовой теории. Без детальных расчётов удаётся вычислить валентность, сделать приближённые оценки ионизационных потенциалов и предсказать размеры и форму атомов.

$Z = 1$ (ВОДОРОД)

Структура атома водорода обсуждалась в предыдущей главе. Единственный электрон находится в состоянии с $n = 1$, энергия которого равна $-13,6$ эВ. Ускоренный разностью потенциалов в $13,6$ В электрон может ионизовать атом водорода. Это минимальное напряжение, необходимое для ионизации атома, называют ионизационным потенциалом. Ионизационный потенциал водорода равен $13,6$ В.

На рис. 5.1, *a* изображена зависимость ионизационных потенциалов различных элементов от атомного номера Z . Отметим периодичность, отвечающую числам 2, 8, 8, 18, 32.

$Z = 2$ (ГЕЛИЙ)

Рассмотрим ион гелия He^+ , состоящий из ядра гелия и единственного электрона. Любое ядро с атомным номером Z и единственным электроном аналогично атому водорода с той лишь разницей, что сила электростатического взаимодействия увеличивается в Z раз. Стоячие волны сохраняют прежний вид, но постоянная k_0 умножается теперь на Z . По-прежнему имеет место формула

$$E_n = -\frac{(k_0 Z)^2 m e^4}{2\hbar^2 n^2} = -13,6 \frac{Z^2}{n^2} \text{ эВ.}$$

Из-за множителя Z^2 ионизационный потенциал He^+ равен $4 \cdot 13,6$ или $54,4$ В. Это подтверждается экспериментом.

Если в окрестности He^+ поместить второй электрон, то он первоначально «видит» заряд, равный $(Z - 1)$. Однако на оболочке с $n = 1$ второй электрон половину времени будет находиться к ядру ближе первого электрона и станет «видеть» при этом заряд ядра Z . Взяв среднее этих величин, получим $(Z - 1/2)$. У электрона в атоме гелия эффективный заряд ядра будет равен $Z_{\text{эф}} = 1,5e$:

$$E_{n,l} = -13,6 \frac{Z_{\text{эф}}^2}{n^2} \text{ эВ,}$$

где $Z_{\text{эф}}$ зависит как от n , так и от l . На основании проведённой оценки $Z_{\text{эф}}$ можно ожидать, что ионизационный потенциал гелия составит примерно $(1,5)^2 \cdot 13,6 \approx 30$ эВ. В действительности из-за наличия положительной потенциальной энергии отталкивания двух электронов связь будет более слабой. У гелия экспериментальное значение ионизационного потенциала равно $24,6$ В. Это самый большой из ионизационных потенциалов всех элементов. Из-за значительного ионизационного потенциала и отсутствия на оболочке с $n = 1$ места для третьего электрона, гелий химически крайне инертен. Химические силы не в состоянии обеспечить энергию в $24,6$ эВ, чтобы мог образоваться положительный ион He^+ . Если попытаться образовать отрицательный ион гелия He^- , то дополнительный электрон должен оказаться в состоянии с $n = 2$. Соответствующая стоячая волна достаточно удалена как от ядра с зарядом $+2e$, так и от отрицательных зарядов обоих электронов в состоянии с $n = 1$. Результирующий заряд в центре волны с $n = 2$ равен нулю, и нет

потенциала, удерживающего волну с $n = 2$. Иными словами, для $n = 2$ $Z_{\text{эф}} \approx 0$. Гелий не образует молекул ни с одним из элементов. Его и другие атомы с заполненными оболочками называют благородными (или инертными) газами. Некоторые из более тяжёлых благородных газов образуют специальные соединения.

Полная энергия связи гелия — энергия, необходимая для разделения атома гелия на ядро и два свободных электрона, определяется следующим образом. Для удаления первого электрона требуется 24,6 эВ, а для удаления второго $13,6 \cdot Z^2 \approx 54,4$ эВ. Сумма этих энергий даёт полную энергию связи, равную 79 эВ.

$Z = 3$ (ЛИТИЙ)

Дважды ионизованный литий Li^{++} имеет водородоподобный спектр, у которого энергии уровней в $(3)^2 = 9$ раз больше, чем у водорода. Спектр однократно ионизованного лития подобен спектру гелия, но с $Z_{\text{эф}} \approx (3 - 1/2)$, а не $(2 - 1/2)$, как в случае гелия. В силу принципа Паули третий электрон в нейтральном атоме лития должен находиться на оболочке с $n = 2$. Для этого электрона $Z_{\text{эф}}$ будет несколько больше единицы. Ионизационный потенциал лития будет несколько больше, чем $13,6/n^2 = 13,6/2^2 = 3,4$ В. Экспериментальное значение равно 5,4 В. Это соответствует $Z_{\text{эф}} = 1,25e$. Второй ионизационный потенциал, соответствующий удалению второго электрона, составляет 75,6 В. В соединениях литий всегда обнаруживает валентность +1 (т. е. теряет один электрон) и никогда не обнаруживает валентность +2 (т. е. не теряет два электрона).

Состояниям в атоме Li с $n = 2, l = 0$ и $n = 2, l = 1$ соответствуют разные энергии. Как видно из рис. 5.3, состоянию с $l = 0$ отвечает более сильная связь, чем состоянию с $l = 1$. Это обусловлено тем, что волновая функция электрона с меньшим моментом импульса ($l = 0$) концентрируется ближе к ядру, по сравнению с волновой функцией состояния с большим значением момента импульса. В действительности, волновые функции ψ всех электронов с $l > 0$ обращаются в нуль при $r = 0$.

Для электронной волны, сосредоточенной вблизи ядра, $Z_{\text{эф}} \approx Z$, а для удалённой от ядра волны $Z_{\text{эф}} \approx 1$. Поэтому у волны с $l = 0$ $Z_{\text{эф}}$ больше, чем у волны с $l = 1$. Это и объясняет, почему $Z_{\text{эф}}$ зависит не только от n , но и от l . Этот эффект может вызывать существенные различия в энергиях подоболочек с $l = 0$ и $l = 1$ или $l = 2$.

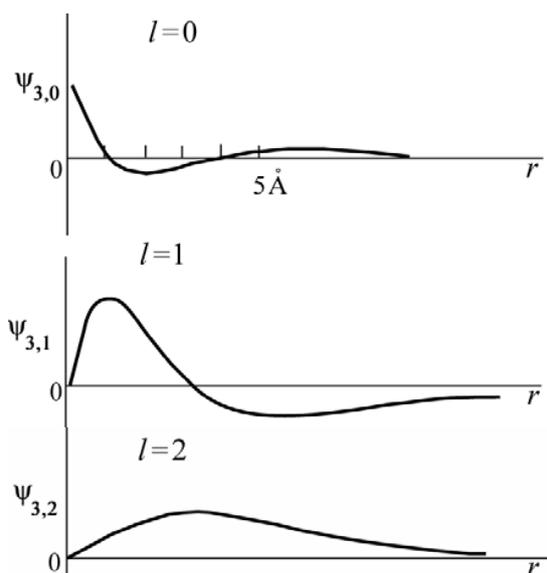


Рис. 5.3. Волновые функции атома водорода в состояниях с $n = 3$, $l = 0, 1$ и 2 . Отметим, что только в случае $l = 0$ волновые функции не обращаются в нуль в начале координат

Действительно, если $Z = 19$ (калий) эффект оказывается настолько сильным, что энергетический уровень с $n = 4$ и $l = 0$ располагается ниже уровня с $n = 3$ и $l = 2$. В табл. 5.1 приведён порядок следования энергетических уровней. Другая интерпретация этого эффекта основана на том, что орбиты с большими значениями моментов импульса оказываются более круговыми и, следовательно, более удалены от ядра, чем орбиты с меньшими моментами импульса. Поэтому состояния с меньшими l связаны более сильно.

$Z = 4$ (БЕРИЛЛИЙ)

Согласно принципу Паули в состоянии с $n = 2$ и $l = 0$ могут находиться два электрона. Поскольку $Z_{эф}$ для близкой к ядру электронной волны оказывается в данном случае больше, чем у лития, более высоким будет и ионизационный потенциал. Если в случае лития значение ионизационного потенциала равно 5,39 В, то в случае бериллия эксперимент дает 9,32 В. Однако второй ионизационный потенциал в случае бериллия оказывается ненамного больше, поскольку второй электрон находится также в состоянии с $n = 2$. Поэтому в соединениях валентность бериллия равна +2.

$Z = 5$ (БОР), $Z = 6$ (УГЛЕРОД), $Z = 7$ (АЗОТ),
 $Z = 8$ (КИСЛОРОД), $Z = 9$ (ФТОР) И $Z = 10$ (НЕОН)

Эти атомы образуются при заполнении состояний с $l = 1$ в оболочке с $n = 2$. Поскольку значению $l = 1$ отвечают три различных значения m_l , на подоболочке ($n = 2$, $l = 1$) могут разместиться 6 электронов. В состоянии с $n = 2$ в атомах бора, углерода и азота находятся, соответственно, три, четыре и пять электронов, что отвечает валентностям +3, +4 и

+5. Причина, почему в атомах бора все три электрона с $n = 2$ (или все четыре электрона в атомах углерода) ведут себя одинаково при образовании химических соединений, связана с процессом гибридизации, который обсуждается в п. 5.6.

Кислород и фтор обнаруживают новое явление, называемое электронным сродством (или сродством к электрону). Отдельный атом фтора может приобрести дополнительный электрон и превратиться в стабильный ион F^- . Соответствующая дополнительному электрону волна частично «видит» большой эффективный заряд $Z_{эф}$, и электрон оказывается связанным с энергией 3,6 эВ. Таким образом, валентность фтора равна -1 . Сродство к электрону при образовании O^- составляет 2,2 эВ. В химических соединениях кислород и азот имеют валентности, соответственно, -2 и -3 .

У неона все состояния с $n = 2$ заняты, т. е. оболочка заполнена. Поскольку электронные волны, отвечающие $n = 2$, частично расположены очень близко к ядру (в данном случае $Z_{эф}$ достигает 10), то ионизационный потенциал оказывается весьма высоким (21,6 В). Неон, как и гелий, является химически инертным.

5.3. Периодическая система элементов

Если продолжить последовательное описание элементов, то мы сразу же обнаружим, что их свойства очень сходны со свойствами уже перечисленных элементов.

ОТ $Z = 11$ (НАТРИЙ) ДО $Z = 18$ (АРГОН)

Согласно принципу Паули одиннадцатый электрон натрия занимает состояние с $n = 3$, для которого $Z_{эф} \approx 1$. Оно соответствует волне значительно больших размеров, чем состояние неона с $n = 2$. Теория предсказывает, что всякий раз, когда внешний электрон попадает на орбиталь с большим квантовым числом n , размер атома будет значительно увеличиваться. Такое резкое увеличение размеров наблюдается для $Z = 3, 11, 19...$ (рис. 5.1, б).

В последовательности из восьми элементов — от натрия до аргона — заполнение состояний с $n = 3, l = 0$ и $n = 3, l = 1$ происходит совершенно аналогично предшествующим восьми элементам. Поэтому химические свойства этих элементов оказываются весьма похожими на свойства соответствующих элементов предыдущей восьмерки. В этом и заключается объяснение «периодической системы» химических элементов. Посмотрим, почему следующему периоду соответствует число 19.

ОТ $Z = 19$ (КАЛИЙ) И ДАЛЕЕ

Логично было бы предположить, что внешний электрон следующего элемента окажется в состоянии с $n = 3$ и $l = 2$. Однако, как указывалось при обсуждении лития ($Z = 3$), для волн с $n = 4$, $l = 0$ величина $Z_{\text{эф}}$ заметно больше, чем в случае волн с $n = 3$, $l = 2$, поскольку волна с $l = 0$ концентрируется в области $r = 0$, где эффективный заряд максимален. Для волны с $n = 4$ и $l = 0$ имеем $Z_{\text{эф}} = 2,26$ и энергию связи $13,6 \cdot Z_{\text{эф}}^2 / 4^2 = 4,34$ эВ, в то время как для волны с $n = 3$, $l = 2$ величина $Z_{\text{эф}}$ несколько меньше 1,7, чему соответствует энергия связи меньше 4,34 эВ. Если бы девятнадцатый электрон оказался в состоянии с $n = 3$, $l = 2$, то очень скоро он перешёл бы в состояние с $n = 4$, $l = 0$, которому отвечает меньшая энергия.

При переходе к $Z = 21$ (скандий) состояние с $n = 4$, $l = 0$ оказывается заполненным, так что при размещении двадцать первого электрона возникнет конкуренция между состояниями $n = 3$, $l = 2$ и $n = 4$, $l = 1$. Более низким оказывается состояние с $n = 3$, поэтому в скандии начинают заполняться десять состояний с $l = 2$ оболочки $n = 3$. Затем заполняются следующие шесть состояний с $n = 4$, $l = 1$. Таким образом, всего имеется $(2 + 10 + 6) = 18$ состояний с близкими энергиями. На рис. 5.4 приведены эти 18 состояний, отвечающие изменению Z от 19 до 36 (см. на рис. 5.4 группу периодичности 4). На этом рисунке показаны относительные расположения энергетических уровней атомов в зависимости от квантовых чисел n и l . Эти энергетические уровни получаются, если взять «голое» ядро с большим атомным номером и поочередно добавлять к нему электрон за электроном. При этом можно было бы измерять энергию, выделяющуюся при переходе каждого электрона на наинизший возможный уровень. Таким способом удалось бы выявить относительное расположение энергетических уровней для всех внутренних электронов.

Следует ожидать, что при любом данном значении n энергия уровней будет скачкообразно увеличиваться с ростом l (рис. 5.4). Это и наблюдается экспериментально. Также заметим, что непосредственно после чисел электронов 2, 10, 18, 36, 54 и 86 имеют место особенно большие скачки энергии.

У элементов с атомными номерами $Z = 2, 10, 18, 36, 54$ и 86 оболочки заполнены, так что внешние электроны связаны особенно прочно. Этими элементами являются благородные газы He, Ne, Ar, Kr, Xe и Rn. Значения квантовых чисел и энергий уровней для каждого электрона любого из элементов можно предсказать заранее.

В табл. 5.1 представлены предсказанные электронные конфигурации атомов. Соответствующая периодическая система элементов при-

ведена в табл. 5.2. Элементы в одной группе (колонке) обладают одними и теми же валентностями и аналогичными химическими свойствами.

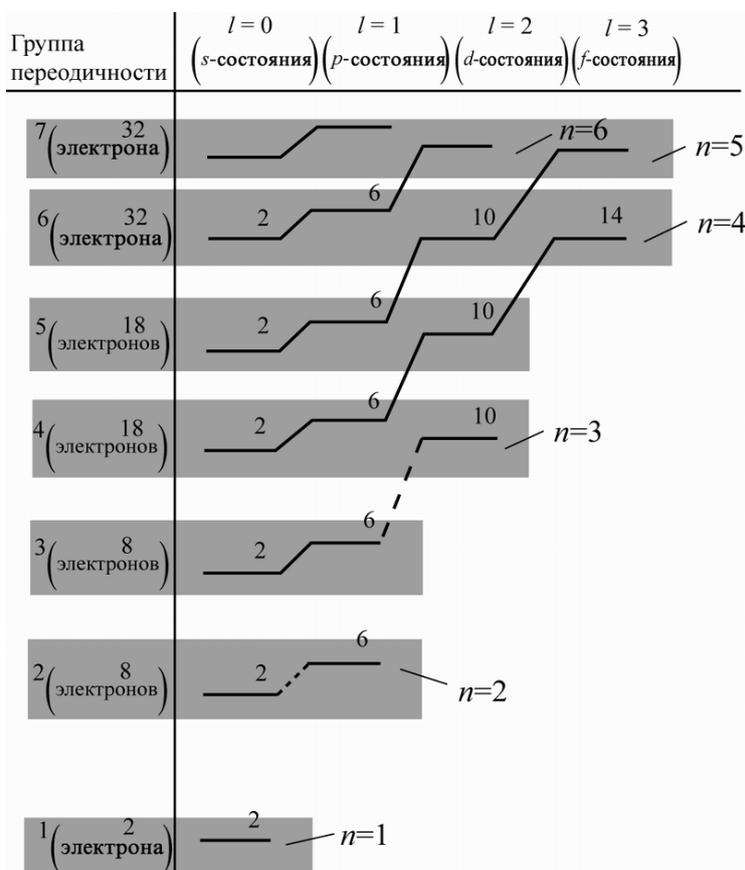


Рис. 5.4. Относительные расстояния между энергетическими уровнями электронов в атомах с высоким Z (показаны не в масштабе). Состояния с одинаковыми главными квантовыми числами соединены штриховыми линиями. Заметим, что с ростом l энергии уровней увеличиваются. Состояния образуют группы периодичности с числом электронов 2, 8, 8, 18, 18, 32, 32

Вычисления с помощью компьютеров точных значений ионизационных потенциалов и электронного сродства требуют громоздких расчётов. Подобные расчёты в принципе выполнимы. Всю химию элементов можно получить из квантовой механики электронов со спином $1/2$.

Найдем значения n и l , которые отвечают внешним электронам 106-го элемента. Рассмотрим его электронную конфигурацию.

Седьмой период начинается с $Z = 87$. Согласно рис. 5.4 семьдесят седьмой и семьдесят восьмой электроны находятся на оболочке $7s$ ($n = 7, l = 0$). Затем ещё 14 электронов занимают состояние $5f^4$ ($n = 5, l = 3$) почти с той же энергией. Оставшиеся 4 электрона образуют конфигурацию $6d^4$ ($n = 6, l = 2$). На рис. 5.4 все эти уровни расположены очень близко друг к другу, так что не совсем ясно, какой из них должен заполняться раньше. В табл. 5.1 показано, в каком порядке эти уровни возникают с ростом Z . Основываясь на этих данных, можно полагать, что электронная конфигурация представляет собой заполненную оболочку Rn , за которой следует конфигурация $5f^4 6d^4 7s^2$.

Таблица 5.1

Электронные конфигурации атомов

Z	Символ	Основная конфигурация	Энергия ионизации, эВ	Z	Символ	Основная конфигурация	Энергия ионизации, эВ
1	H	1s	13,595	52	Te	4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁴	9,01
2	He	1s ²	24,581	53	I	4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁵	10,454
3	Li	[He] 2s	5,390	54	Xe	4d ¹⁰ 5s ² 5p ⁶	12,127
4	Be	2s ²	9,320	55	Cs	[Xe] 6s	3,893
5	B	2s ² 2p	8,296	56	Ba	6s ²	5,210
6	C	2s ² 2p ²	11,256	57	La	5d ¹ 6s ²	5,61
7	N	2s ² 2p ³	14,545	58	Ce	4f ¹ 5d ¹ 6s ²	6,54
8	O	2s ² 2p ⁴	13,614	59	Pr	4f ³ 6s ²	5,48
9	F	2s ² 2p ⁵	17,418	60	Nd	4f ⁴ 6s ²	5,51
10	Ne	2s ² 2p ⁶	21,559	61	Pm	4f ⁵ 6s ²	
11	Na	[Ne] 3s	5,138	62	Fm	4f ⁶ 6s ²	5,6
12	Mg	3s ²	7,644	63	Eu	4f ⁷ 6s ²	5,67
13	Al	3s ² 3p	5,984	64	Gd	4f ⁷ 5d ¹ 6s ²	6,16
14	Si	3s ² 3p ²	8,149	65	Tb	4f ⁹ 6s ²	6,74
15	P	3s ² 3p ³	10,484	66	Dy	4f ¹⁰ 6s ²	6,82
16	S	3s ² 3p ⁴	10,357	67	Ho	4f ¹¹ 6s ²	
17	Cl	3s ² 3p ⁵	13,01	68	Er	4f ¹² 6s ²	
18	Ar	3s ² 3p ⁶	15,755	69	Tm	4f ¹³ 6s ²	
19	K	[Ar] 4s	4,339	70	Yb	4f ¹⁴ 6s ²	6,22
20	Ca	4s ²	6,111	71	Lu	4f ¹⁴ 5d ¹ 6s ²	6,15
21	Sc	3d ¹ 4s ²	6,54	72	Hf	4f ¹⁴ 5d ² 6s ²	7,0
22	Ti	3d ² 4s ²	6,83	73	Ta	4f ¹⁴ 5d ³ 6s ²	7,88
23	V	3d ³ 4s ²	6,74	74	W	4f ¹⁴ 5d ⁴ 6s ²	7,98
24	Cr	3d ⁵ 4s	6,76	75	Re	4f ¹⁴ 5d ⁵ 6s ²	7,87
25	Mn	3d ⁵ 4s ²	7,432	76	Os	4f ¹⁴ 5d ⁶ 6s ²	8,7
26	Fe	3d ⁶ 4s ²	7,87	77	Ir	4f ¹⁴ 5d ⁷ 6s ²	9,2
27	Co	3d ⁷ 4s ²	7,86	78	Pt	4f ¹⁴ 5d ⁸ 6s ²	8,88
28	Ni	3d ⁸ 4s ²	7,633	79	Au	[Xe, 4f ¹⁴ 5d ¹⁰] 6s	9,22
29	C	3d ¹⁰ 4s	7,724	80	Hg	6s ²	10,434
30	Zn	3d ¹⁰ 4s ²	9,391	81	Tl	6s ² 6p	6,106
31	Ga	3d ¹⁰ 4s ² 4p	6,00	82	Pb	6s ² 6p ²	7,415
31	Ge	3d ¹⁰ 4s ² 4p ²	7,88	83	Bi	6s ² 6p ³	7,287
33	As	3d ¹⁰ 4s ² 4p ³	9,81	84	Po	6s ² 6p ⁴	8,43
34	Se	3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁴	9,75	85	At	6s ² 6p ⁵	
35	Br	3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁵	11,84	86	Rn	6s ² 6p ⁶	10,745
36	Kr	3d ¹⁰ 4s ² 4p ⁶	13,996	87	Fr	[Rn] 7s	
37	Rb	[Kr] 5s	4,176	88	Ra	7s ²	5,277
38	Sr	5s ²	5,692	89	Ac	6d ¹ 7s ²	6,9
39	Y	4d ¹ 5s ²	6,377	90	Th	6d ² 7s ²	
40	Zr	4d ² 5s ²	6,835	91	Pa	5f ² 6d ¹ 7s ²	
41	Nb	4d ⁴ 5s	6,881	92	U	5f ³ 6d ¹ 7s ²	4,0
42	Mo	4d ⁵ 5s	7,10	93	Np	5f ⁴ 6d ¹ 7s ²	
43	Tc	4d ⁵ 5s ²	7,228	94	Pu	5f ⁶ 7s ²	
44	Ru	4d ⁷ 5s	7,365	95	Am	5f ⁷ 7s ²	
45	Rh	4d ⁸ 5s	7,461	96	Cm	5f ⁷ 6d ¹ 7s ²	
46	Pd	4d ¹⁰	8,33	97	Bk	5f ⁸ 6d ¹ 7s ²	
47	Ag	4d ¹⁰ 5s	7,574	98	Cf	5f ¹⁰ 7s ²	
48	Cd	4d ¹⁰ 5s ²	8,991	99	Es	5f ¹¹ 7s ²	
49	In	4d ¹⁰ 5s ² 5p	5,785	100	Fm	5f ¹² 7s	
50	Sn	4d ¹⁰ 5s ² 5p ²	7,342	101	Mv	5f ¹³ 7s ²	
51	Sb	4d ¹⁰ 5s ² 5p ³	8,639	102	No	5f ¹⁴ 7s ²	
				103	Lw	5f ¹⁴ 6d ¹ 7s ²	
				104	Ku	5f ¹⁴ 6d ² 7s ²	

Примечание. Символами s , p , d , f обозначаются состояния, соответствующие значениям $l = 0, 1, 2, 3$. Например, конфигурация для кислорода ($Z = 8$) представляет собой $[\text{He}] 2s^2 2p^4$. Элемент в квадратных скобках означает, что внутренние оболочки заполняются, как и в данном элементе (в нашем случае, как у He). Выражение $2s^2 2p^4$ означает, что имеются два электрона в состоянии $2s$ и четыре электрона в состоянии $2p$. Запись $2p$ соответствует $n = 2, l = 1$.

Таблица 5.2

Периодическая система элементов Д.И. Менделеева

Группы элементов																																							
	V				VI				VII				VIII																										
Периоды	Ряды	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII																														
I	1	H 1,00797 Водород	Li 6,941 Литий	Be 9,01218 Бериллий	B 10,81 Бор	C 12,011 Углерод	N 14,0067 Азот	O 15,999 Кислород	F 18,9984 Фтор	Ne 20,17 Неон																													
II	2	Na 22,98977 Натрий	Mg 24,305 Магний	Al 26,98154 Алюминий	Si 28,086 Кремний	P 30,9738 Фосфор	S 32,064 Сера	Cl 35,454 Хлор	Ar 39,94 Аргон																														
III	3	K 39,098 Калий	Ca 40,08 Кальций	Sc 44,9559 Скандий	Ti 47,90 Титан	V 50,9415 Ванадий	Cr 51,996 Хром	Mn 54,9380 Марганец	Fe 55,84 Железо	Co 58,9332 Кобальт	Ni 58,70 Никель	Cu 63,54 Медь	Zn 65,38 Цинк	Ga 69,723 Галлий	Ge 72,50 Германий	As 74,9216 Мышьяк	Se 78,96 Селен	Br 79,904 Бром	Kr 83,804 Криптон																				
IV	4	Rb 85,467 Рубидий	Sr 87,62 Стронций	Y 88,9059 Иттрий	Zr 91,22 Цирконий	Nb 92,9064 Ниобий	Mo 95,94 Молибден	Tc 98,9062 Технеций	Ru 101,0 Рутений	Rh 102,9055 Родий	Pd 106,4 Палладий	Ag 107,8682 Серебро	Cd 112,41 Кадмий	In 114,82 Индий	Sn 118,60 Олово	Sb 121,70 Сурьма	Te 127,6 Теллур	I 126,9045 Йод	Xe 131,29 Ксенон	Cs 132,90547 Цезий	Ba 137,33 Барий	Hg 200,5 Ртуть	Ra 226,0254 Радий	Fr 223,0197 Франций	Ac 227,028 Актиний	Th 232,0381 Торий	Pa 231,0359 Протактиний	U 238,02 Уран	Np 237,0482 Нептуний	Pu 244,0642 Плутоний	Am 243,0614 Америций	Cm 247,0703 Кюрий	Bk 247,07 Берклий	Cf 251,0796 Калифорний	Es 252,0828 Эйнштейний	Fm 257,0951 Фермиум	Md 288,10 Менделевий	No 289,1009 Нобелий	Lr 260,1054 Лоуренсий
V	5	Rb 85,467 Рубидий	Sr 87,62 Стронций	Y 88,9059 Иттрий	Zr 91,22 Цирконий	Nb 92,9064 Ниобий	Mo 95,94 Молибден	Tc 98,9062 Технеций	Ru 101,0 Рутений	Rh 102,9055 Родий	Pd 106,4 Палладий	Ag 107,8682 Серебро	Cd 112,41 Кадмий	In 114,82 Индий	Sn 118,60 Олово	Sb 121,70 Сурьма	Te 127,6 Теллур	I 126,9045 Йод	Xe 131,29 Ксенон	Cs 132,90547 Цезий	Ba 137,33 Барий	Hg 200,5 Ртуть	Ra 226,0254 Радий	Fr 223,0197 Франций	Ac 227,028 Актиний	Th 232,0381 Торий	Pa 231,0359 Протактиний	U 238,02 Уран	Np 237,0482 Нептуний	Pu 244,0642 Плутоний	Am 243,0614 Америций	Cm 247,0703 Кюрий	Bk 247,07 Берклий	Cf 251,0796 Калифорний	Es 252,0828 Эйнштейний	Fm 257,0951 Фермиум	Md 288,10 Менделевий	No 289,1009 Нобелий	Lr 260,1054 Лоуренсий
VI	6	Rb 85,467 Рубидий	Sr 87,62 Стронций	Y 88,9059 Иттрий	Zr 91,22 Цирконий	Nb 92,9064 Ниобий	Mo 95,94 Молибден	Tc 98,9062 Технеций	Ru 101,0 Рутений	Rh 102,9055 Родий	Pd 106,4 Палладий	Ag 107,8682 Серебро	Cd 112,41 Кадмий	In 114,82 Индий	Sn 118,60 Олово	Sb 121,70 Сурьма	Te 127,6 Теллур	I 126,9045 Йод	Xe 131,29 Ксенон	Cs 132,90547 Цезий	Ba 137,33 Барий	Hg 200,5 Ртуть	Ra 226,0254 Радий	Fr 223,0197 Франций	Ac 227,028 Актиний	Th 232,0381 Торий	Pa 231,0359 Протактиний	U 238,02 Уран	Np 237,0482 Нептуний	Pu 244,0642 Плутоний	Am 243,0614 Америций	Cm 247,0703 Кюрий	Bk 247,07 Берклий	Cf 251,0796 Калифорний	Es 252,0828 Эйнштейний	Fm 257,0951 Фермиум	Md 288,10 Менделевий	No 289,1009 Нобелий	Lr 260,1054 Лоуренсий
VII	7	Rb 85,467 Рубидий	Sr 87,62 Стронций	Y 88,9059 Иттрий	Zr 91,22 Цирконий	Nb 92,9064 Ниобий	Mo 95,94 Молибден	Tc 98,9062 Технеций	Ru 101,0 Рутений	Rh 102,9055 Родий	Pd 106,4 Палладий	Ag 107,8682 Серебро	Cd 112,41 Кадмий	In 114,82 Индий	Sn 118,60 Олово	Sb 121,70 Сурьма	Te 127,6 Теллур	I 126,9045 Йод	Xe 131,29 Ксенон	Cs 132,90547 Цезий	Ba 137,33 Барий	Hg 200,5 Ртуть	Ra 226,0254 Радий	Fr 223,0197 Франций	Ac 227,028 Актиний	Th 232,0381 Торий	Pa 231,0359 Протактиний	U 238,02 Уран	Np 237,0482 Нептуний	Pu 244,0642 Плутоний	Am 243,0614 Америций	Cm 247,0703 Кюрий	Bk 247,07 Берклий	Cf 251,0796 Калифорний	Es 252,0828 Эйнштейний	Fm 257,0951 Фермиум	Md 288,10 Менделевий	No 289,1009 Нобелий	Lr 260,1054 Лоуренсий
VIII	8	Rb 85,467 Рубидий	Sr 87,62 Стронций	Y 88,9059 Иттрий	Zr 91,22 Цирконий	Nb 92,9064 Ниобий	Mo 95,94 Молибден	Tc 98,9062 Технеций	Ru 101,0 Рутений	Rh 102,9055 Родий	Pd 106,4 Палладий	Ag 107,8682 Серебро	Cd 112,41 Кадмий	In 114,82 Индий	Sn 118,60 Олово	Sb 121,70 Сурьма	Te 127,6 Теллур	I 126,9045 Йод	Xe 131,29 Ксенон	Cs 132,90547 Цезий	Ba 137,33 Барий	Hg 200,5 Ртуть	Ra 226,0254 Радий	Fr 223,0197 Франций	Ac 227,028 Актиний	Th 232,0381 Торий	Pa 231,0359 Протактиний	U 238,02 Уран	Np 237,0482 Нептуний	Pu 244,0642 Плутоний	Am 243,0614 Америций	Cm 247,0703 Кюрий	Bk 247,07 Берклий	Cf 251,0796 Калифорний	Es 252,0828 Эйнштейний	Fm 257,0951 Фермиум	Md 288,10 Менделевий	No 289,1009 Нобелий	Lr 260,1054 Лоуренсий
IX	9	Rb 85,467 Рубидий	Sr 87,62 Стронций	Y 88,9059 Иттрий	Zr 91,22 Цирконий	Nb 92,9064 Ниобий	Mo 95,94 Молибден	Tc 98,9062 Технеций	Ru 101,0 Рутений	Rh 102,9055 Родий	Pd 106,4 Палладий	Ag 107,8682 Серебро	Cd 112,41 Кадмий	In 114,82 Индий	Sn 118,60 Олово	Sb 121,70 Сурьма	Te 127,6 Теллур	I 126,9045 Йод	Xe 131,29 Ксенон	Cs 132,90547 Цезий	Ba 137,33 Барий	Hg 200,5 Ртуть	Ra 226,0254 Радий	Fr 223,0197 Франций	Ac 227,028 Актиний	Th 232,0381 Торий	Pa 231,0359 Протактиний	U 238,02 Уран	Np 237,0482 Нептуний	Pu 244,0642 Плутоний	Am 243,0614 Америций	Cm 247,0703 Кюрий	Bk 247,07 Берклий	Cf 251,0796 Калифорний	Es 252,0828 Эйнштейний	Fm 257,0951 Фермиум	Md 288,10 Менделевий	No 289,1009 Нобелий	Lr 260,1054 Лоуренсий
X	10	Rb 85,467 Рубидий	Sr 87,62 Стронций	Y 88,9059 Иттрий	Zr 91,22 Цирконий	Nb 92,9064 Ниобий	Mo 95,94 Молибден	Tc 98,9062 Технеций	Ru 101,0 Рутений	Rh 102,9055 Родий	Pd 106,4 Палладий	Ag 107,8682 Серебро	Cd 112,41 Кадмий	In 114,82 Индий	Sn 118,60 Олово	Sb 121,70 Сурьма	Te 127,6 Теллур	I 126,9045 Йод	Xe 131,29 Ксенон	Cs 132,90547 Цезий	Ba 137,33 Барий	Hg 200,5 Ртуть	Ra 226,0254 Радий	Fr 223,0197 Франций	Ac 227,028 Актиний	Th 232,0381 Торий	Pa 231,0359 Протактиний	U 238,02 Уран	Np 237,0482 Нептуний	Pu 244,0642 Плутоний	Am 243,0614 Америций	Cm 247,0703 Кюрий	Bk 247,07 Берклий	Cf 251,0796 Калифорний	Es 252,0828 Эйнштейний	Fm 257,0951 Фермиум	Md 288,10 Менделевий	No 289,1009 Нобелий	Lr 260,1054 Лоуренсий

* ЛАНТАНИДЫ

Ce 140,12 Церий	Pr 140,9077 Празеодим	Nd 144,24 Неодим	Pm [145] Прометий	Sm 150,36 Самарий	Eu 151,96 Европий	Gd 157,25 Гадолиний	Tb 158,925 Тербий	Dy 162,50 Диспрозий	Ho 164,93 Гольмий	Er 167,26 Эрбий	Tm 168,9342 Тулий	Yb 173,04 Иттербий	Lu 174,967 Лютеций
------------------------------	------------------------------------	-------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	--------------------------------	----------------------------------	--------------------------------	------------------------------	--------------------------------	---------------------------------	---------------------------------

** АКТИНИДЫ

Th 232,0381 Торий	Pa 231,0359 Протактиний	U 238,02 Уран	Np 237,0482 Нептуний	Pu 244,0642 Плутоний	Am 243,0614 Америций	Cm 247,0703 Кюрий	Bk 247,07 Берклий	Cf 251,0796 Калифорний	Es 252,0828 Эйнштейний	Fm 257,0951 Фермиум	Md 288,10 Менделевий	No 289,1009 Нобелий	Lr 260,1054 Лоуренсий
--------------------------------	--------------------------------------	----------------------------	-----------------------------------	-----------------------------------	-----------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	-------------------------------------	-------------------------------------	----------------------------------	-----------------------------------	----------------------------------	------------------------------------

Примечание. В таблицу не включены элементы, синтезированные в последнее время, например, Rg¹¹¹ – Рентгений.

5.4. Рентгеновское излучение

В любом атоме два первых электрона образуют электронную конфигурацию гелия (гелиевый остов, п. 5.6). Энергия связи этих электронов равна $13,62 \cdot Z_{\text{эф}}^2$ эВ. Благодаря экранирующему действию электронов с $l = 0$, атомы с более высокими атомными номерами имеют $Z_{\text{эф}} \approx (Z - 2)$. В атомах с очень большим атомным номером энергия связи двух электронов, принадлежащих оболочке с $n = 1$, заметно превышает 10^4 эВ, а энергия связи внешних электронов составляет всего несколько электронвольт.

Если образец данного элемента поместить в электрическую дугу или разрядную трубку, то его атомы начнут терять внешние электроны, допустимые квантовые переходы окажутся порядка нескольких электронвольт, а характеристический спектр будет содержать линии соответствующих длин волн. Поскольку фотону с энергией 1 эВ отвечает длина волны $\lambda = 12390 \text{ \AA}$, характеристический спектр типичного элемента будет состоять из линий в инфракрасной, видимой и ультрафиолетовой областях.

Когда у атома удалён внутренний электрон, то внешний электрон мог бы заместить внутренний электрон: в таком случае испустится фотон с энергией, в тысячи раз превышающей обычную. Длина волны этого фотона в сотни или тысячи раз короче длины волны видимого света. Фотоны с λ в интервале $0,1 \text{ \AA} < \lambda < 100 \text{ \AA}$ называют рентгеновским излучением. Чтобы удалить внутренний электрон, можно облучать образец пучком электронов, кинетическая энергия которых больше энергии связи внутренних электронов. Из приведённого ниже примера следует, что пучок электронов с энергией 1650 эВ (или выше) способен вырвать из алюминия электроны, находящиеся на оболочке с $n = 1$. Согласно принятой для рентгеновского излучения терминологии, электроны с $n = 1$ называются электронами *K*-оболочки.

В качестве примера найдем максимальную энергию рентгеновского излучения алюминия и свинца. Вычислим значения энергии и длин волн фотонов.

Максимальная энергия рентгеновского излучения отвечает переходу свободного электрона (с нулевой энергией) на вакантное место в *K*-оболочке.

У алюминия $Z = 13$ и $h\nu = 13,6 \cdot (13 - 2)^2 \text{ эВ} = 1,65 \text{ кэВ}$. Соответствующая длина волны $\lambda = 7,5 \text{ \AA}$.

У свинца $Z = 82$ и $h\nu = 13,6 \cdot (82 - 2)^2 \text{ эВ} = 87 \text{ кэВ}$ и $\lambda = 0,14 \text{ \AA}$.

Этот пример иллюстрирует надёжный метод определения значений Z у вновь открытых элементов путем измерения длины волны жесткого рентгеновского излучения, испускаемого неизвестным образцом при бомбардировке его электронами.

5.5. Связь в молекулах

Рассмотрим два различных механизма, обеспечивающих два типа связи атомов в молекулах (ионную и ковалентную).

Ионная связь. Если два нейтральных атома постепенно сближать друг с другом, то в случае ионной связи наступает момент, когда внешний электрон одного из атомов переходит к другому атому. Атом, потерявший электрон, ведёт себя как частица с положительным зарядом $+e$, а атом, приобретший лишний электрон, — как частица с отрицательным зарядом $-e$. Потенциальная энергия электростатического взаимодействия между ними $U = -k_0e^2/R$, где R — расстояние между центрами двух ионов. В качестве примера рассмотрим образование молекулы фторида лития LiF. Энергия ионизации лития 5,4 эВ, а электронное сродство фтора 3,6 эВ. Результирующая энергия, необходимая для удаления электрона лития и присоединения его к фтору, составляет $(5,4 - 3,6) = 1,8$ эВ. Если оба атома находятся на расстоянии $R = 8 \text{ \AA}$ друг от друга, то $k_0e^2/R = 1,8$ эВ. На расстояниях, меньших чем 8 \AA , внешний электрон лития перейдёт к атому фтора и окажется в состоянии с меньшей энергией.

Этот процесс показан на рис. 5.5, где приведены контуры электронной плотности, полученные расчётом полных электронных плотностей обоих атомов. В нижней части рисунка представлена результирующая энергия системы. Когда атомы сближаются на расстояние $R = 8 \text{ \AA}$ (конфигурация *b* на рис. 5.5), внешний электрон атома лития переходит к атому фтора. В конфигурации *h* энергия начинает расти благодаря отталкиванию внутренних электронов обоих атомов. Минимум энергии достигается на расстоянии $R = 1,5 \text{ \AA}$, на котором результирующая энергия связи составляет 4,3 эВ (устойчивая конфигурация *g*).

Ковалентная связь. Другой распространённый тип молекулярной связи, встречающийся у большинства органических соединений, носит название ковалентной связи. Ковалентная связь образуется, когда электроны обобществляются двумя атомами. Примером ковалентной связи является молекула водорода. Рассмотрим ионизованную молекулу водорода H_2^+ . Она состоит из двух протонов, окружённых электронным облаком. В присутствии двух протонов энергия связи электрона оказывается больше, чем при наличии только одного протона.

С другой стороны, электростатическое отталкивание протонов стремится разорвать связь. Однако вследствие тенденции электронной волны концентрироваться в области между протонами, преобладающим оказывается электростатическое притяжение электрона к обоим

протонам. В H_2^+ энергия связи атома водорода с ионом водорода составляет 2,65 эВ. Иными словами, требуется затратить $(2,65 + 13,6)$ эВ, чтобы ион H_2^+ полностью диссоциировал на два протона и электрон.

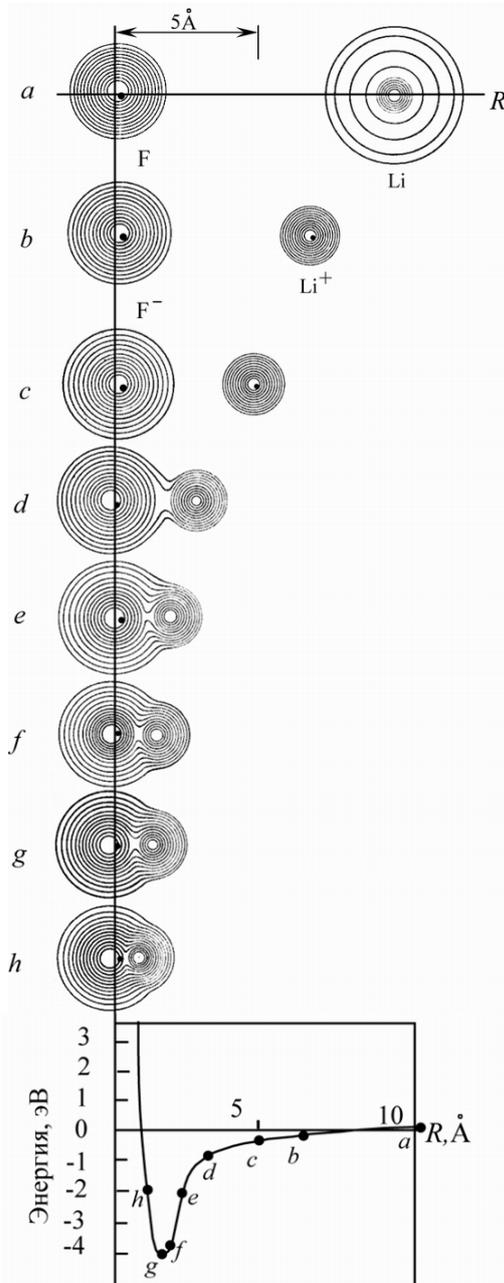


Рис. 5.5. Расчётные зависимости полной электронной плотности лития и фтора от расстояния R между этими атомами. В нижней части рисунка приведена результирующая энергия как функция от R . В каждой последующей конфигурации электронная плотность уменьшается вдвое (в конфигурации e она уменьшается до 3%). Заметим, что в конфигурации b внешний электрон атома лития «перескочил» к атому фтора

Согласно принципу Паули на орбите, где находится первый электрон, имеется место ещё для одного электрона. Такая система из двух электронов и протонов представляет собой нейтральную молекулу водорода. Из-за электростатического отталкивания двух электронов их волновая функция оказывается несколько более размытой, чем волновая функция единственного электрона в H_2^+ .

В нейтральной молекуле водорода энергия связи двух атомов составляет 4,48 эВ. На рис. 5.6 приведены вычисленные контуры электронной плотности и энергии связи двух атомов Н в зависимости от расстояния между ними.

Атомы углерода обычно образуют соединения с ковалентной связью. Атом углерода имеет тенденцию обобществить четыре дополнительных электрона с тем, чтобы заполнить ими свою оболочку с $n = 2, l = 1$.

Простейшим примером является молекула CH_4 (метан), изображённая на рис. 5.7. Как и в молекуле водорода, электронные волны стремятся сконцентрироваться главным образом между положительными зарядами, где они вносят наибольший вклад в энергию связи.

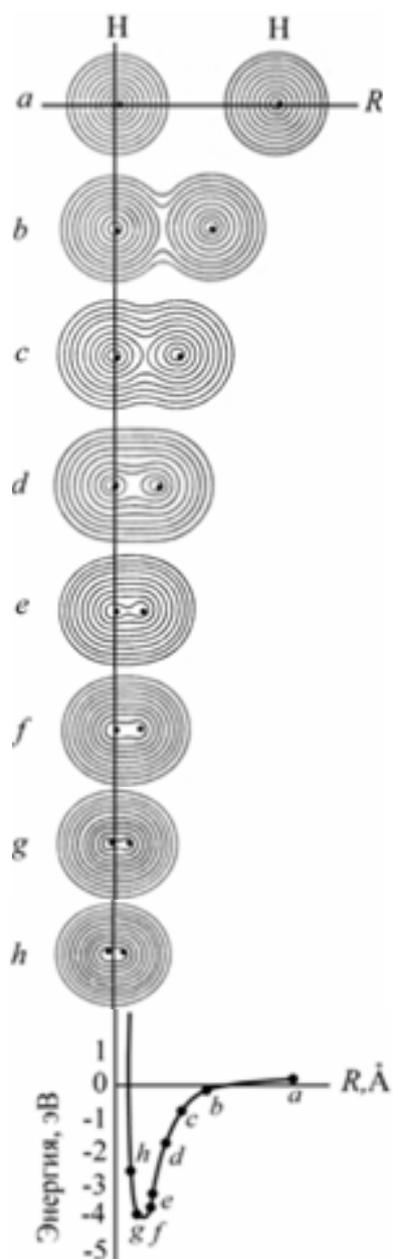


Рис. 5.6. Ковалентная связь. Два водородных атома исследуются таким же образом, как и на рис. 5.5

Поскольку четыре электронных облака взаимно отталкиваются, конфигурация с наименьшей энергией соответствует их максимальному удалению друг от друга (рис. 5.7). Конфигурация электронных волн в молекулах определяется уравнением Шрёдингера, а также условием, что энергия уровней должна быть по возможности минимальной.

5.6. Гибридизация

При образовании молекул четыре электрона атома углерода с $n = 2$ способны «растекаться» и играть равноценную роль. В этом случае углерод приобретает валентность, равную 4. Это возможно, даже если первые два электрона с $n = 2$ более сильно связаны на заполненной подоболочке с $l = 0$. Точно так же бор ($Z = 5$) с единственным электроном в состоянии с $l = 1$ имеет валентность 3, а не 1. Это связано с тем, что атомы в молекулах не тождественны изолированным атомам. В изолированном атоме существует различие между электронами в состояниях с $l = 0$ и $l = 1$.

В п. 5.2 указывалось, что электроны с $l = 0$ в действительности связаны более сильно, чем электроны с $l = 1$. Однако молекулы — это не просто сумма атомов. Например, в молекуле CH_4 , кроме ядра углерода, имеются еще 4 центра сосредоточения положительного заряда. Решение уравнения Шрёдингера в виде стоячих волн для системы из пяти атомных ядер оказывается более сложным и для основного состояния приводит к конфигурации, показанной на рис. 5.7.

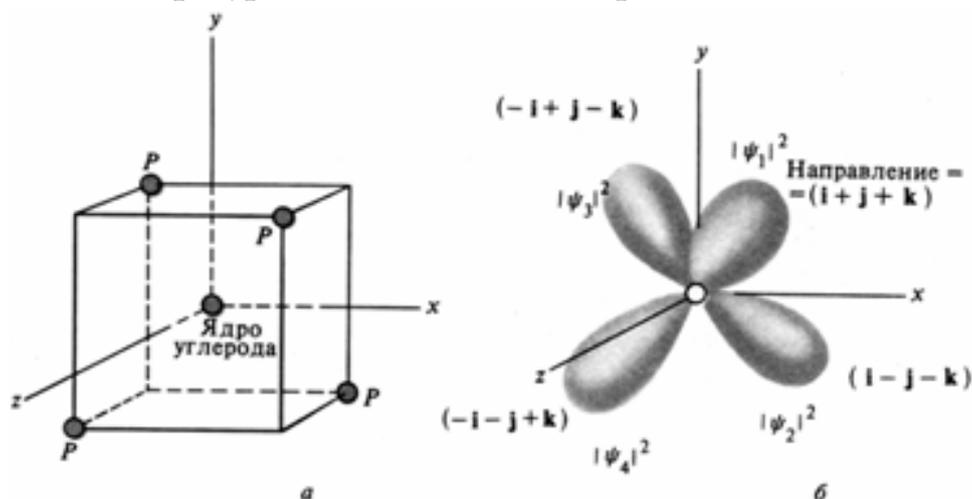


Рис. 5.7. Относительные ориентации ядра углерода и четырёх ядер водорода (протонов) в молекуле CH_4 (а); б — четыре электронных облака, или лепестки, простирающиеся от ядра углерода и окутывающие протоны, каждый из лепестков содержит по два электрона с ковалентной связью

Хотя стоячие волны, описывающие четыре внешних электрона, выглядят совершенно иначе, чем стоячие волны в атоме, их можно формально представить в виде суперпозиции водородоподобных стоячих волн (см. п. 4.4). Действительно, любую стоячую волну можно разложить в ряд по водородоподобным волновым функциям. В случае атома углерода энергии связи четырёх внешних электронов одинаковы и соответствуют энергии связи электрона на уровне с $n = 2$. Можно ожидать, что электронные стоячие волны являются комбинацией главным образом функций $\psi_{2,0,0}$, $\psi_{2,1,0}$, $\psi_{2,1,1}$ и $\psi_{2,1,-1}$. Комбинации, приводящие к изображённым на рис. 5.7 распределениям, записываются в виде:

$$\psi_1 = \frac{1}{2}(s + p_x + p_y + p_z); \quad \psi_2 = \frac{1}{2}(s + p_x - p_y - p_z);$$

$$\psi_3 = \frac{1}{2}(s - p_x + p_y - p_z); \quad \psi_4 = \frac{1}{2}(s - p_x - p_y + p_z),$$

где $s = -\psi_{2,0,0}$; $p_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1})$; $p_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2,1,1} - \psi_{2,1,-1})$; $p_z = \psi_{2,1,0}$.

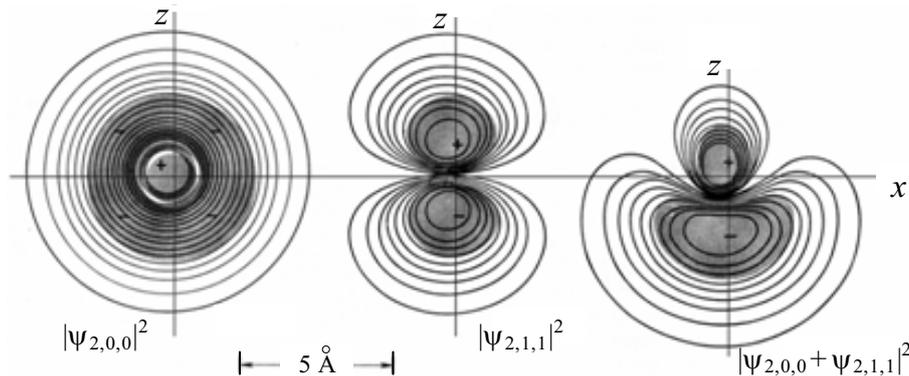


Рис. 5.8. Контуры электронной плотности. Заштрихованная область соответствует максимуму электронной плотности (в пределах 40 %). Знаки «+» и «-» указывают полярность волновой функции до того как она возведена в квадрат

На рис. 5.8 показана комбинация функций $\psi_{2,0,0}$ и $\psi_{2,1,1}$, приводящая к электронному облаку, вытянутому в одном направлении. На этом рисунке $\psi_{sp} = \psi_{2,0,0} + \psi_{2,1,1}$. Заметим, что за исключением небольшой центральной области, волновая функция $\psi_{2,0,0}$ отрицательна в любом направлении, тогда как $\psi_{2,1,1}$ положительна в положительном направлении оси z и отрицательна в обратном.

Волновые функции $\psi_{2,0,0}$ и $\psi_{2,1,1}$ имеют противоположные знаки в положительном направлении оси z . Это приводит к их взаимному ослаблению. В отрицательном направлении они усиливают друг друга. Сло-

жение волновых функций отдельных атомов, приводящее к образованию направленных лепестков, называется гибридизацией. Электронное облако на рис. 5.8 называется sp -орбиталью, а четыре облака на рис. 5.7 – sp^3 -орбиталями.

Согласно табл. 4.2 и рис. 4.7 волновая функция $\psi_{2pz} \equiv \psi_{2,1,0}$ имеет форму гантели, ось которой направлена вдоль оси z . Покажем, что функция

$$\psi_{2p_x} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2,1,1} + \psi_{2,1,-1})$$

соответствует той же форме гантели, но ось которой направлена вдоль оси x . Используя табл. 4.2, можно записать

$$\psi_{2p_x} = \frac{r}{\sqrt{2a}} e^{-r/a} \cdot \sin \theta \cdot (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}).$$

Поскольку $\cos \varphi = (e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})/2$,

$$\psi_{2p_x} = \frac{2r}{\sqrt{2a}} e^{-r/a} \sin \theta \cos \varphi.$$

Из рис. 4.3 следует, что $\sin \theta = \rho/r$ и $\cos \varphi = x/\rho$, и произведение этих величин дает x/r . Учитывая это, получаем следующее выражение:

$$\psi_{2p_x} = \frac{2r}{\sqrt{2a}} e^{-r/a} \left(\frac{x}{r} \right) = \frac{2r}{\sqrt{2a}} e^{-r/a} \cos \theta_x,$$

где θ_x – угол между вектором \mathbf{r} и осью x (рис. 5.9).

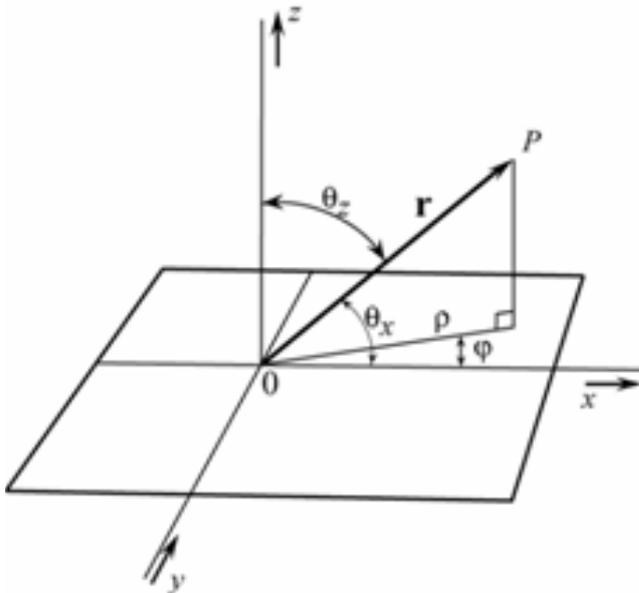


Рис. 5.9. Радиус-вектор \mathbf{r} точки P составляет угол θ_z с осью z и угол θ_x с осью x (ρ – проекция вектора \mathbf{r} на плоскость xy)

Это выражение по виду аналогично выражению для

$$\psi_{2,1,0} = (r/a) e^{-r/2a} \cos \theta_z,$$

где θ_z – обычный полярный угол.

Функция ψ_{2p_x} симметрична относительно оси x , тогда как ψ_{2p_z} симметрична относительно оси z . Следовательно, ψ_{2p_x} имеет форму гантели, ориентированной вдоль оси x .

Основные выводы

Физические и химические свойства элементов обнаруживают сходство в группах из 2, 8, 8, 18, 18, 32, 32 элементов. Группы, содержащие 2, 8, 18, 32 элемента, можно получить на основе рассмотрения стоячих электронных волн или орбиталей атома водорода и принципа Паули, согласно которому в данном квантовом состоянии может находиться лишь один электрон. Поскольку у электронов имеется собственный момент импульса, равный $\hbar/2$, каждой орбитали соответствуют два разрешённых состояния.

Свойства элементов, такие как валентность и ионизационный потенциал, можно объяснить с помощью некоторых полуколичественных рассуждений, используя водородоподобные стоячие волны с энергиями связи $(13,6/n^2) \cdot Z_{\text{эф}}^2$ эВ, где $Z_{\text{эф}}$ — «средний» заряд центральной части атома, в поле которого находится рассматриваемый электрон.

При данном n электроны с более высокими l расположены дальше от ядра и «видят» меньший заряд $Z_{\text{эф}}$ и, следовательно, связаны слабее. Поэтому энергетические уровни с более высокими l группируются с уровнями, соответствующими более высоким n , но меньшим l , так что количество элементов в группах образует последовательность чисел 2, 8, 8, 18, 18, 32, 32. Рентгеновское излучение представляет собой фотоны с энергией $h\nu$ выше 100 эВ, испускаемые тяжелыми атомами после удаления электронов с внутренних орбит. Внешние электроны быстро переходят на более низкие орбиты и заполняют свободное состояние. Электрон на K -оболочке имеет энергию около $13,6 \cdot (Z - 2)^2$ эВ; это максимальная энергия, которую может иметь рентгеновское излучение.

Атомы удерживаются в молекулах за счёт либо ионной, либо ковалентной связи. В случае ионной связи потенциальная энергия системы, состоящей из положительного и отрицательного ионов, $U \approx -k_0 e^2 / R$, где R — расстояние между центрами ионов. В случае ковалентной связи атомы обобществляют одни и те же внешние электроны.

Упражнения

1. С помощью рис. 5.1 определите межатомное расстояние в жидком натрии и калии.
2. Сколько электронов отвечает главному квантовому числу $n = 4$ в тяжёлом атоме, таком как атом урана? Сколько у него электронов с $n = 5$?
3. Какие линии в спектре иона Li^{++} можно обнаружить глазом?
4. Какова величина $Z_{\text{эф}}$ для внешнего электрона в ионе F^- ? (Воспользуйтесь измеренным значением электронного сродства.)
5. Некоторые линии в спектре He^+ соответствуют видимой области. Найдите их длины волн.
6. Какова величина $Z_{\text{эф}}$ для электронов в ионе Li^+ ? (Воспользуйтесь измеренным значением энергии связи.)
7. Найдите максимальную энергию рентгеновского излучения, испускаемого ураном.
8. Длина волны рентгеновского излучения, имеющего максимальную энергию и испускаемого неизвестным образцом, составляет $2,16 \text{ \AA}$. Каков атомный номер Z элемента, входящего в состав образца?
9. Сколько энергии надо затратить, чтобы разделить молекулу водорода H_2 на два свободных протона и два свободных электрона?
10. Какая электронная конфигурация ожидается для элемента с номером $Z = 107$?

Задачи

1. Дополните рис. 5.4 данными о восьмой группе периодичности. Сколько элементов будет в этой группе?
2. Результирующая энергия связи молекулы LiF равна $4,3 \text{ эВ}$. Чему равна молярная теплота образования этого вещества?
3. В принятой для рентгеновского излучения терминологии восемь электронов с $n = 2$ находятся на L -оболочке.
 - а) Вычислите $Z_{\text{эф}}$ для $2p$ -электрона с L -оболочки. (Считайте, что $2p$ -электроны находятся внутри.)
 - б) По той же терминологии при переходе $2p$ -электрона на K -оболочку возникает K_{α} -линия спектра. Определите длины волн, отвечающие K_{α} -линиям в спектрах алюминия и свинца.
4. Пусть состояние атома водорода соответствует $n = 10$, $l = 9$. Каково отношение вероятности найти при фиксированном r электрон

под углом 70° к той же вероятности для угла 90° ? Можно воспользоваться табл. 4.2. Изобразите форму электронного облака. Углы отсчитываются от оси, вдоль которой направлен момент импульса.

5. Покажите, что волновая функция

$$\psi_{2p_y} \equiv (1/\sqrt{2})(\psi_{2,1,1} - \psi_{2,1,-1})$$

имеет форму гантели, как и $\psi_{2,1,0}$, но вытянутую вдоль оси y , а не вдоль оси z .

- а) Найдите выражение для $\psi_{2,1,1}$ через ψ_{2p_x} и ψ_{2p_y} .
- б) Как запишутся волновые функции ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 и ψ_4 , приведённые в п. 5.5, через $\psi_{2,0,0}$, $\psi_{2,1,1}$, $\psi_{2,1,0}$ и $\psi_{2,1,-1}$?
6. Измеренные длины волн K_α -линий в случае Al и Pb равны 8,3 и 0,17 Å, соответственно. Найдите $Z_{эф}$ для $2p$ -электронов атомов Al и Pb.
7. В H_2^+ протоны находятся на расстоянии друг от друга 1,06 Å. Каким было бы это расстояние, если бы протоны связывал мюон μ^- (масса которого в 207 раз больше массы электрона)?
8. Свойства элементов повторяются в группах, содержащих 2, 8, 8, 18, 18, 32, 32 ... элементов. Сколько элементов было бы в следующей группе, начиная с $Z = 119$? (Ядра считаются стабильными.)

6. КОНДЕНСИРОВАННЫЕ СРЕДЫ

6.1. Введение

Если достаточно сильно охладить вещество (элемент или соединение), находящееся в газообразном или жидком состоянии, то оно переходит в твёрдое состояние, характеризующееся относительным постоянством взаимного расположения атомов. Исключение составляет гелий, остающийся жидким (при атмосферном давлении) и при $T = 0$ К. Твёрдая фаза гелия образуется только при $p > 25$ атм. Раздел физики, изучающий свойства твёрдых тел и жидкостей и происходящие в них явления, называется физикой конденсированных сред, или физикой твёрдого тела, и в настоящее время представляет собой одну из основных областей физических исследований.

Физика конденсированных сред использует результаты глубокого изучения сущности явлений для предсказания новых явлений, которые вряд ли иначе были бы обнаружены.

Большинство элементов и соединений имеют кристаллическую структуру. Частицы поваренной соли (NaCl) имеют вид идеальных кубиков. Многие твёрдые вещества, внешне не похожие на кристаллы, в действительности состоят из множества мельчайших кристалликов (это, так называемая, поликристаллическая структура). Силы, связывающие атомы в молекулы, могут приводить к образованию безграничных твёрдых периодических структур, которые можно рассматривать как сверхмолекулы. Подобно ионным и ковалентным молекулам, существуют ионные и ковалентные кристаллы, а также твёрдые тела с металлической связью, не имеющей аналога в двухатомных молекулах. Мы рассмотрим эти три типа связи, уделив особое внимание металлам и полупроводникам, и обсудим квантово-механические явления в больших масштабах, такие как сверхтекучесть и автоэлектронная эмиссия. В дополнение к общей теории рассмотрим ряд примеров исполь-

зования полупроводников: полупроводниковые диоды, транзисторы, светодиоды, твердотельные лазеры, фотоэлементы, солнечные батареи, термисторы, интегральные схемы и т. д.

6.2. Типы связи

Ионная связь. Подобно ионным и ковалентным молекулам, существуют ионные и ковалентные кристаллы. На рис. 6.1 изображена структура ионного кристалла NaCl. Отметим, что ближайшими соседями у каждого иона Na^+ являются шесть ионов Cl^- . Этому пространственному расположению ионов Na^+ и Cl^- отвечает наименьшая энергия (т. е. при образовании такой конфигурации выделяется максимальная энергия), чем и объясняется то, что при охлаждении ниже точки плавления NaCl и многие другие вещества стремятся образовывать чистые кристаллы.

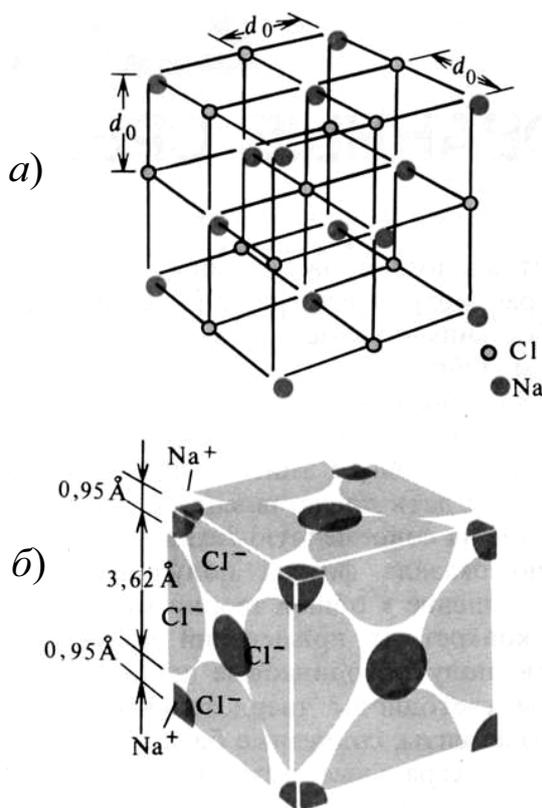


Рис. 6.1. Кристаллическая структура NaCl. Положения центров атомов Na и Cl отмечены кружками: а – расположение центров атомов; б – расположение самих атомов

С ростом температуры тепловая кинетическая энергия в конечном счете оказывается достаточной, чтобы преодолеть связь в правильном кристалле, и кристалл расплавляется.

Ковалентная связь. В предыдущей главе мы показали, что углерод, имеющий валентность 4, образует ковалентные связи с четырьмя элек-

тронами других атомов. Примером такой связи может служить молекула CH_4 (см. рис. 5.7). Разновидностью твёрдого углерода с наиболее сильной связью является алмаз (рис. 6.2). Если четыре атома водорода в CH_4 заменить атомами углерода, то получится элементарная ячейка кристаллической структуры алмаза (рис. 6.2). Структуры, аналогичные алмазу, образуют при кристаллизации и другие четырёхвалентные элементы, такие как германий, кремний и олово. Для валентных электронов кристалла германия были вычислены контуры постоянной плотности заряда. Из рис. 6.3, *a* видно, что электронные облака концентрируются посередине между каждой парой атомов германия, образуя ковалентные связи.

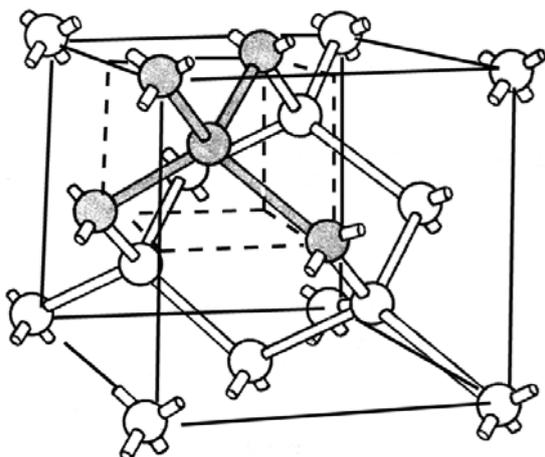


Рис. 6.2. Кристаллическая структура алмаза. Каждый атом имеет по четыре ближайших соседа

Металлическая связь. Допустим, что один из валентных электронов перешёл на более высокий энергетический уровень. Можно ожидать, что его волновая функция станет более размытой. Но при этом электрон окажется ближе к соседним атомам. Поскольку остовы (керы) этих атомов обладают положительным зарядом и притягивают электрон, то они будут ещё больше размывать электронную волновую функцию, что приведёт к перекрытию её с соседней волновой функцией. В результате такого эффекта волновая функция окажется равномерно размытой по всему кристаллу (с некоторыми сгущениями вблизи каждого притягивающего атомного остова).

Отсюда можно заключить, что как только валентный электрон в кристалле германия переходит на следующий более высокий энергетический уровень, он ведёт себя как свободный электрон (т. е. электрон проводимости). В германии, для того чтобы поднять валентный электрон на следующий, более высокий уровень, необходима энергия 0,66 эВ (при $T = 300 \text{ K}$). Иначе говоря, между валентным состоянием и состоянием проводимости имеется энергетическая щель шириной 0,66 эВ. Такие вещества называются полупроводниками, поскольку

при нормальных условиях они имеют незначительное количество электронов проводимости. В п. 6.4 мы вернёмся к изучению германия и других полупроводников.

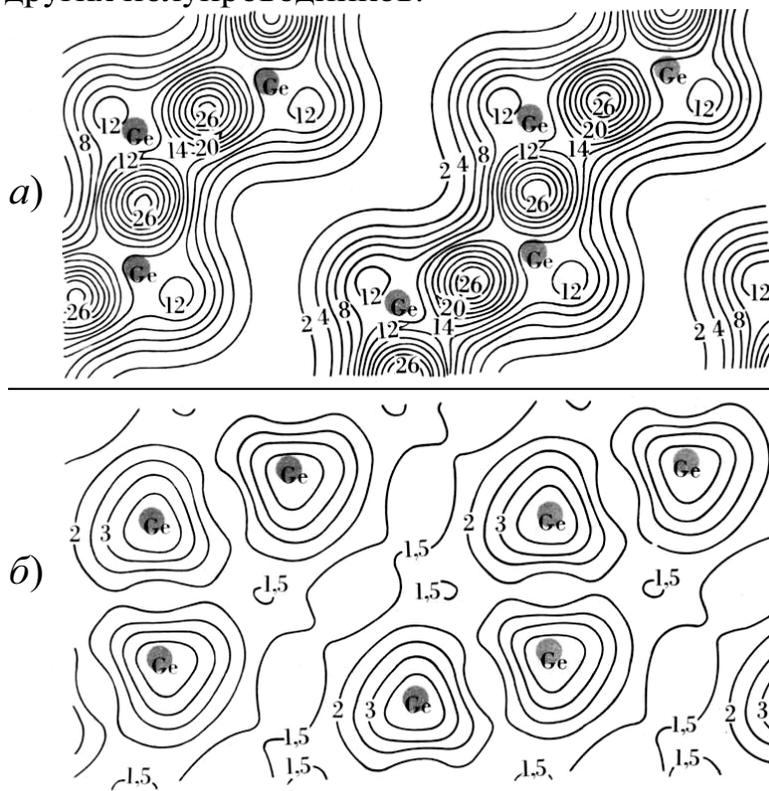


Рис. 6.3. Контуры плотности отрицательного заряда, усреднённого по состояниям валентного электрона в кристалле германия (а); б – то же для следующих возбуждённых состояний

В кристаллах, построенных из одновалентных атомов (таких как Li, Na, K), плотность заряда распределяется аналогично тому, как это показано на рис. 6.3, б. Кристаллы с таким типом связи называются металлами. Металлическая связь возникает, когда атомы сближаются на расстояние, меньшее размеров облака внешних электронов. Вследствие принципа Паули такая конфигурация приводит к возрастанию энергии внешних электронов. Для металлов эта энергия будет все же меньше, чем если бы атомы находились на больших расстояниях друг от друга.

Если атомы сближаются настолько, что их внутренние заполненные оболочки соприкасаются, то соседние ядра попадают в пределы области, занимаемой облаком внешних электронов у свободного атома. Внешний электрон будет притягиваться соседними ядрами. Это приведёт к возрастанию его энергии связи и к ещё большему увеличению размеров соответствующего облака. Электрон приближается к удалённым соседям, и те в свою очередь ещё больше «размывают» электронное облако. В конечном итоге волновая функция каждого из внешних электронов равномерно распределяется по всему кристаллу.

Квантовая теория объясняет, почему металлы проводят электричество, а другие вещества нет. То, что в металлах приходится, по крайней мере, один «свободный» электрон на каждый атом, обусловлено отчасти волновой природой электронов. Эти «свободные» электроны, или электроны проводимости, не связаны с каким-то определённым атомом и могут свободно перемещаться по металлу в любом направлении.

В ионных и ковалентных кристаллах внешние электроны связаны (локализованы), поэтому такие кристаллы обычно не проводят электричество. Их называют *изоляторами*.

Тот факт, что в кристаллах чистых металлов могут существовать свободные электроны, следует рассматривать как квантово-механическое явление в больших, макроскопических масштабах. С точки зрения классической физики, каждый электрон принадлежал бы своему собственному атому.

6.3. Теория свободных электронов в металлах

В первом приближении силы притяжения, действующие со стороны ядра на внешний электрон, можно усреднить и представить в виде постоянного потенциала притяжения: обозначим его U_0 . На рис. 6.4 приведена эта усредненная потенциальная энергия, имеющая вид потенциальной ямы.

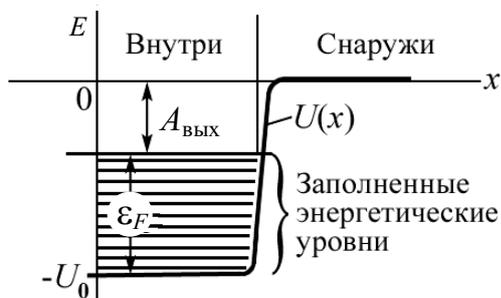


Рис. 6.4. Потенциальная энергия внешнего электрона при переходе через поверхность металла приблизительно показана сплошной линией. На рисунке также приведены уровень Ферми ε_F и работа выхода $A_{\text{вых}}$

Каждый внешний электрон описывается стоячей волной, ограниченной размерами этой потенциальной ямы. Мы видим теперь, что приведённый в гл. 4 гипотетический пример электрона в ящике не выглядит столь уж надуманным. В этом приближении металл объёмом V можно рассматривать как ящик того же объёма V , содержащий N свободных электронов. Согласно принципу Паули в каждом из состояний, описываемых выражением $\psi(x) = A \sin k_x x$, может находиться не более двух электронов. Все N электроны стремятся заполнить низшие энергетические состояния, образуя, так называемый, ферми-газ.

Такой газ обладает свойствами, необычными с точки зрения классической физики, на которые впервые обратил внимание Энрико Ферми. Данные N электронов заполняют все энергетические состояния от низшего до состояния с кинетической энергией ε_F , называемого уровнем Ферми^{*)}. Величина ε_F должна зависеть от N и объема V . Мы сейчас покажем, что она зависит только от отношения $n = N/V$, определяющего число электронов проводимости в единице объёма.

Расчёты упростятся, если выбрать ящик в форме куба, объёмом L^3 . Если в этот ящик поместить один-единственный электрон, то он быстро излучит избыток энергии и перейдёт на низший энергетический уровень. На тот же уровень перейдёт и второй электрон. Согласно принципу Паули третий электрон будет вынужден занять следующий, более высокий, т. е. второй энергетический уровень. Пятый электрон займёт третий энергетический уровень и т. д. Если в ящике имеется всего N электронов, то уровню Ферми отвечает энергия уровня с номером $N/2$. Как указывалось в п. 2 гл.4, уровни энергии в трёхмерном ящике зависят от трёх квантовых чисел n_x, n_y, n_z , причём

$$n_x = \frac{2Lp_x}{h}; \quad n_y = \frac{2Lp_y}{h}; \quad n_z = \frac{2Lp_z}{h}; \quad p^2 = \frac{h^2}{4L^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

Пусть p_F — импульс электрона на уровне Ферми. Тогда p_F — максимально возможное значение p_x любого из N электронов в ящике. В этом случае максимальное значение n_x , соответствующее заполненному состоянию, равно $(n_x)_F = 2Lp_F/h$; то же самое имеем для n_y и n_z . Чтобы получить полное число заполненных состояний, нам надо сосчитать все возможные комбинации из трёх чисел n_x, n_y и n_z , каждое из которых не превышает значения $2Lp_F/h$. Такой подсчёт был бы крайне утомительным, но можно воспользоваться рис. 6.5. На этом рисунке для удобства n_x, n_y и n_z отсчитываются через интервалы 1 см, соответственно, вдоль осей x, y и z .

При этом любое возможное состояние (или набор трёх целых чисел) изображается точкой в пространстве. Эти точки образуют кубическую решётку с ребром ячейки, равным 1 см. Заметим, что число таких кубических ячеек равно числу точек. Теперь воспользуемся тем, что заполненные состояния находятся внутри области радиусом $R = 2Lp_F/h$. Полное число заполнённых состояний будет численно равно количе-

^{*)} Уровень Ферми (энергия Ферми) — энергия, ниже которой все состояния системы частиц или квазичастиц (дырок), подчиняющихся статистике Ферми—Дирака, заполнены, а выше — пусты при абсолютном нуле температуры ($T = 0$ К). Или это уровень, вероятность заполнения которого в условиях теплового равновесия равна $1/2$.

ству кубических ячеек, ограниченных сферической поверхностью, показанной на рис. 6.5. Поскольку объём, ограниченный этой поверхностью, равен 1/8 объёма сферы, мы можем записать:

$$\text{Полное число состояний} = \frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi R^3 \right) = \frac{\pi}{6} \left(\frac{2Lp_F}{h} \right)^3 = \frac{4\pi L^3 p_F^3}{3h^3}.$$

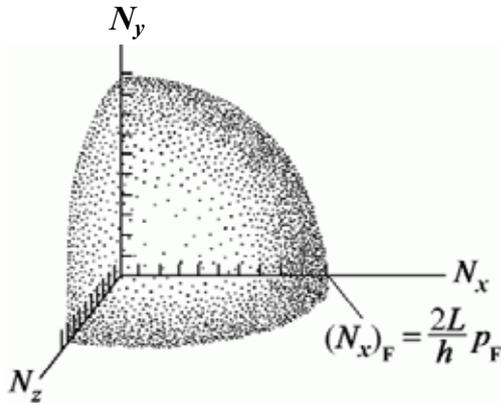


Рис. 6.5. Верхний квадрант сферы радиусом $R = 2Lp_F/h$

Поскольку в каждом состоянии находятся два электрона с противоположными спинами, полное число электронов —

$$N = \frac{8\pi V p_F^3}{3h^3}, \quad \text{где } V = L^3 \text{ — объём ящика.}$$

Получаем для p_F :

$$p_F = \frac{h}{2} \left(\frac{3N}{\pi V} \right)^{1/3} \quad (\text{граничный импульс Ферми}).$$

Подстановка этого результата в выражение $\varepsilon_F = p_F^2/(2m)$ даёт

$$\varepsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3n}{\pi} \right)^{2/3} \quad (\text{граничная энергия Ферми}).$$

Эта величина не зависит ни от конкретной формы, ни от объёма данного образца металла. Она зависит лишь от того, насколько плотно «упакованы» свободные электроны, т. е. от концентрации свободных электронов.

Так, литий имеет плотность $\rho = 534 \text{ кг/м}^3$. Найдём значение граничной энергии Ферми (в электронвольтах) у электронов проводимости лития. Атом лития имеет лишь один внешний электрон. Следовательно, n равно числу атомов в 1 м^3 . Поскольку молярная масса лития $m = 6,94 \cdot 10^{-3} \text{ кг/моль}$, то

$$n = \frac{\rho N_A}{\mu} = \frac{534 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}}{6,94 \cdot 10^{-3}} = 4,63 \cdot 10^{28} \frac{\text{электрон}}{\text{м}^3}.$$

Используя соотношения для ε_F — энергии Ферми, получаем

$$\varepsilon_F = \frac{(6,63 \cdot 10^{-34})^2}{8 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31}} \cdot \left(\frac{3}{\pi} \cdot 4,63 \cdot 10^{28} \right)^{2/3} = 7,55 \cdot 10^{-19} [\text{Дж}] = 4,7 \text{ эВ}.$$

Найдем также выражение для средней кинетической энергии $\langle K \rangle$ в зависимости от ε_F . Полная энергия Ферми в образце, содержащем N электронов проводимости, равна $N\langle K \rangle$. Если dN — число электронов, импульсы которых находятся в интервале от p до $(p + dp)$, то по определению средняя кинетическая энергия

$$\langle K \rangle = \frac{\int K(p) dN}{\int dN}.$$

Дифференцирование выражения для N даёт

$$dN = \frac{8\pi V p^2 dp}{h^3}.$$

Таким образом,

$$\langle K \rangle = \frac{\int K p^2 dp}{\int p^2 dp} = \frac{\int (p^2/2m) p^2 dp}{(p^3/3)|_0^{p_F}} = \frac{1}{2m} \frac{(p^5/5)|_0^{p_F}}{p_F^3/3} = \frac{3}{5} \varepsilon_F.$$

Если плотность электронов чрезвычайно высока (как в случае некоторых астрономических объектов), то практически все электроны будут ультрарелятивистскими. Иными словами, $E = K = pc$. Найдём в этом случае энергию Ферми ε_F , выраженную через n , и среднюю кинетическую энергию $\langle K \rangle$.

Релятивистское значение граничной энергии Ферми получаем умножением обеих частей выражения для p_F на скорость света c :

$$\varepsilon_F = cp_F = \frac{ch}{2} \left(\frac{3}{\pi} \frac{N}{V} \right)^{1/3},$$

$$\langle K \rangle = \frac{\int K dN}{\int dN} = \frac{\int (cp) p^2 dp}{\int p^2 dp} = c \frac{p_F^4/4}{p_F^3/3} = \frac{3}{4} \varepsilon_F.$$

Потенциальная энергия электрона внутри металла имеет приблизительно вид, показанный на рис. 6.4. За нулевую мы выбрали энергию покоящегося свободного электрона вне металла. Энергетические уровни электронов ферми-газа обозначены горизонтальными линиями, начинающимися при $-U_0$ и заполняющими интервал энергии ε_F от дна

потенциальной ямы. При этом минимальная энергия, необходимая для удаления электрона из металла, равна величине $(U_0 - \varepsilon_F)$, определяемой как работа выхода $A_{\text{вых}}$ (см. п. 2.7):

$$A_{\text{вых}} = U_0 - \varepsilon_F.$$

Энергия Ферми ε_F характеризует максимальную кинетическую энергию электрона при абсолютном нуле температуры, а уровень Ферми (уровень электрохимического потенциала) $(\varepsilon_F - U_0)$ характеризует полную энергию E электрона в электростатическом поле кристалла. По модулю эта энергия равна работе выхода $A_{\text{вых}}$ электрона:

$$E = \varepsilon_F + U = \varepsilon_F + (-U_0) = -(U_0 - \varepsilon_F),$$

$$E = -A_{\text{вых}}.$$

На энергетической шкале уровень Ферми соответствует величине $A_{\text{вых}}$ (рис. 6.4). Строго определённое значение работы выхода имеется только при температуре абсолютного нуля. При температуре T (К) электроны находятся в тепловом равновесии, поэтому к их энергии Ферми добавляется ещё некоторая тепловая энергия. Средняя тепловая энергия, приходящаяся на одну частицу идеального газа, составляет $(3/2)kT$. В ферми-газе тепловую энергию имеют лишь частицы, кинетическая энергия которых близка к ε_F . Кинетическая энергия некоторой части электронов будет чуть больше ε_F ; при комнатной температуре $kT \approx 0,025$ эВ, в то время как величины ε_F и $A_{\text{вых}}$ оказываются порядка нескольких электронвольт.

6.4. Зонная теория твёрдых тел

При описании состояний электрона в металле не учитывалось периодическое изменение потенциальной энергии электрона, связанное с его взаимодействием с атомными остовами. Предполагалось, что дно потенциальной ямы (рис. 6.4) плоское и не имеет периодических углублений.

Если же учесть такие периодические изменения потенциальной энергии, то окажется, что возможные значения энергии образуют ряд зон.

В качестве первого примера рассмотрим две одномерные прямоугольные потенциальные ямы глубиной U_0 и шириной x_0 . Они соответствуют эффекту, который дают два последовательно расположенных атомных остова. Первоначальный энергетический уровень основного состояния, существовавший в каждой из ям, превращается в «зону» с двумя значениями энергии.

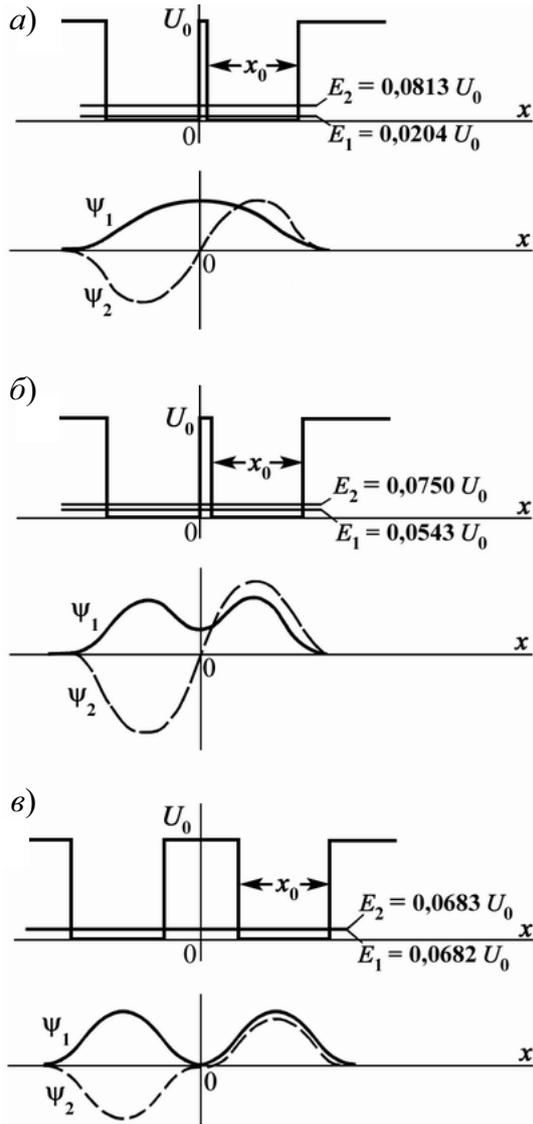


Рис. 6.6. Первые два энергетических уровня в прямоугольной яме шириной $2x_0$, составленной из двух ям шириной x_0 каждая (а); показаны также соответствующие стоячие волны; $U_0 = 50\hbar^2/(mx_0^2) = 378$ эВ; б – две ямы, изображенные на рис. а, раздвигаются на расстояние $x_0/10$; заметим, что энергетические уровни сближаются; в – при удалении двух ям на достаточно большое расстояние друг от друга оба энергетических уровня почти сливаются, а волновая функция в пределах каждой ямы практически совпадает с волновой функцией основного состояния

В случае же N последовательно расположенных прямоугольных ям основному состоянию будет соответствовать зона, содержащая N энергетических уровней. Энергии уровней в отдельной прямоугольной яме можно записать приближённо в виде

$$E_n \approx \frac{N^2}{L^2} \frac{h^2}{8m}, \text{ где } L \text{ — ширина ямы.}$$

Если теперь, как показано на рис. 6.6, а, соединить две ямы в одну, но с удвоенной шириной ($L = 2x_0$), то получим

$$E_n \approx \frac{N^2}{4x_0^2} \frac{h^2}{8m}; \quad E_1 \approx \frac{1}{4} \frac{h^2}{8mx_0^2} \quad \text{и} \quad E_2 \approx \frac{h^2}{8mx_0^2}.$$

На рис. 6.6, б яма «двойной ширины» поделена на две соседствующие одинаковые ямы. Заметим, что энергии, отвечающие волновым

функциям ψ_1 и ψ_2 , сблизилась друг с другом. На рис. 6.6, *в* обе ямы раздвинуты настолько, что стоячие волны в каждой из них по существу совпадают с низшей стоячей волной в отдельной яме. Следовательно,

$$E_1 \approx E_2 \approx \frac{h^2}{8mx_0^2}.$$

Таким образом, при сближении двух ям, изображённых на рис. 6.6, *в*, уровни энергии, отвечающие ψ_1 и ψ_2 , раздвигаются. Состояние с наименьшей энергией отдельной ямы превращается в два состояния с различными энергиями в случае двух ям, причём чем меньше расстояние между ямами, тем сильнее раздвинуты соответствующие энергетические уровни.

Повторим это рассмотрение для четырёх ям, расположенных друг за другом (рис. 6.7). Ямы на рис. 6.7, *а* можно рассматривать как одну яму, но учетверенной ширины ($L = 4x_0$). Энергии уровней вычисляются с помощью выражения:

$$E_n \approx \frac{N^2}{16} \frac{h^2}{8mx_0^2}.$$

Если ямы несколько раздвинуть (рис. 6.7, *б*), то зона, содержащая четыре энергетических уровня, станет уже. На рис. 6.7, *в* ямы разнесены на столь большое расстояние, что соответствующие энергии почти совпадают с энергией основного состояния в случае отдельной ямы.

Этот результат нетрудно обобщить на случай N расположенных друг за другом ям. При этом в окрестности исходного уровня должна образоваться зона из N энергетических уровней. Увеличение числа N не приводит к изменению ширины зоны при условии, что расстояние между ямами остаётся тем же самым. В образцах твёрдого тела типичные значения N оказываются порядка 10^{23} , так что образованную энергетическими уровнями зону можно считать сплошной.

У реальных твёрдых тел одномерную прямоугольную яму следует заменить трёхмерной потенциальной ямой атома. При сближении N атомов каждое атомное состояние будет превращаться в зону, содержащую N соответствующих энергетических уровней. Чем ближе атомы расположены друг к другу, тем шире зоны (рис. 6.8).

Предположим, что имеется цепочка из 100 прямоугольных ям, шириной $x_0 = 1 \text{ \AA}$ и глубиной $U_0 = 378 \text{ эВ}$. Пусть расстояние между ямами также равно 1 \AA . Найдём энергии первых 100 уровней.

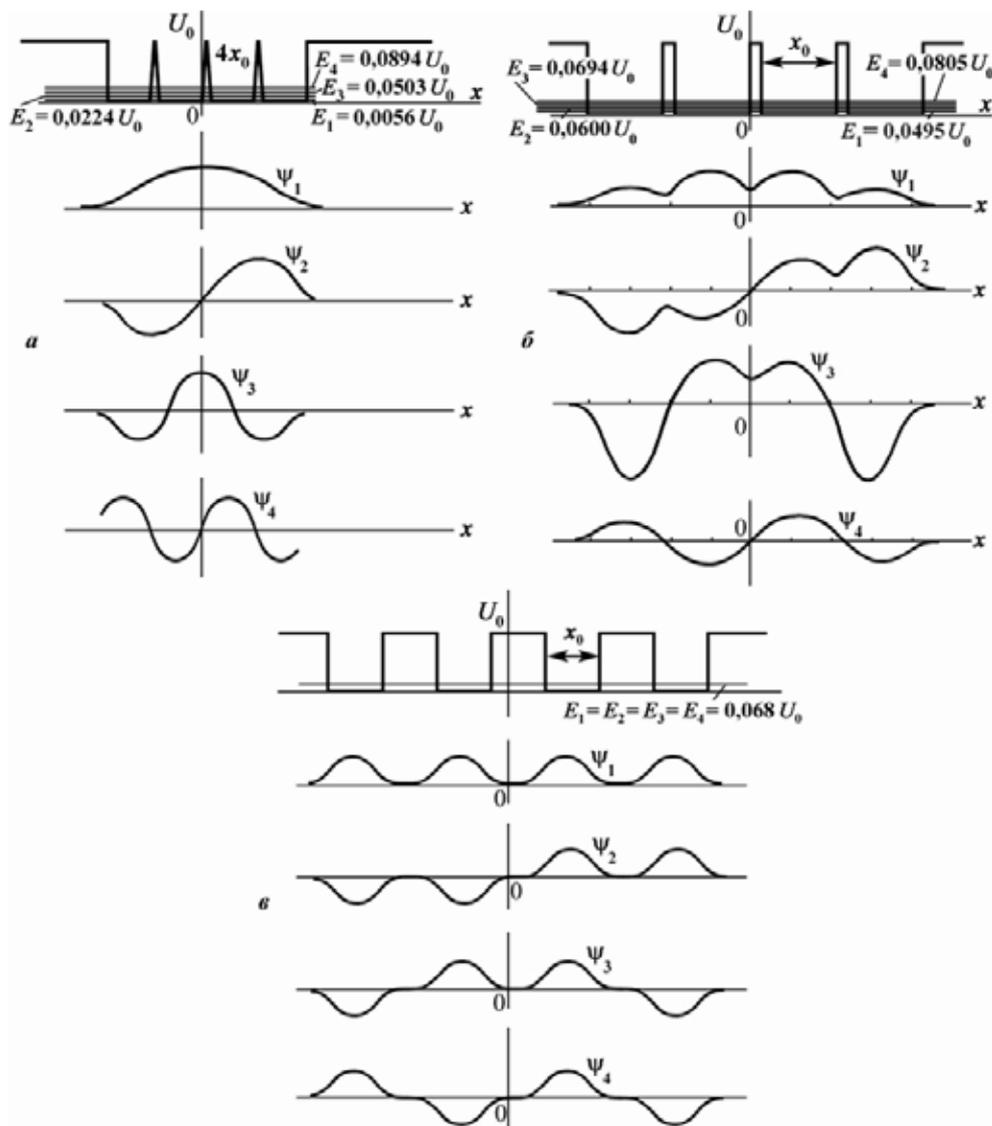


Рис. 6.7. Яма шириной $4x_0$, составленная из четырёх ям шириной x_0 каждая; показаны четыре первых энергетических уровня (а); б – расстояние между ямами $x_0/10$; в – расстояние между ямами x_0 – все четыре энергетических уровня почти сливаются

Глубина ямы та же, что и на рис. 6.7, для которого $U_0 = 50\hbar^2/mx_0^2 = 378$ эВ. Расстояние между ямами такое же, как и на рис. 6.7, в, где зона, отвечающая основному состоянию (первые 100 энергетических уровней), соответствует $E \approx 0,068U_0 = 25,7$ эВ. Пусть теперь расстояние между ямами равно $0,1 \text{ \AA}$ (рис. 6.7, б). При этом зона простирается от $0,0495U_0$ до $0,0805U_0$, или от $18,7$ до $30,4$ эВ. Следовательно, $E_1 = 18,7$ эВ, а $E_{100} = 30,4$ эВ. Уровень E_{50} лежит приблизительно посередине между E_1 и E_{100} . Таким образом, $E_{50} \approx 24,5$ эВ.

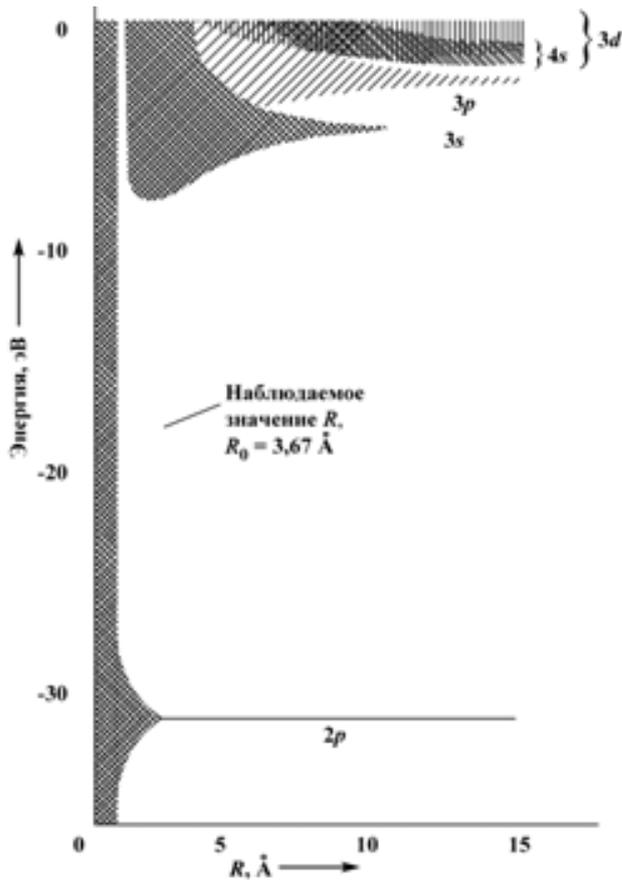


Рис. 6.8. Энергетические зоны натрия в зависимости от межатомного расстояния R . Зона $2s$ располагается при $-63,4$ эВ, а зона $1s$ — при -1041 эВ. Обе эти зоны ещё уже, чем зона $2p$

Для металлической связи характерно столь близкое расположение потенциальных ям, что зона, в которой находится внешний электрон, перекрывается с другими зонами. Это справедливо для энергетических зон металлического натрия, изображённых на рис. 6.8. Как и в модели свободных электронов, в металле в данном случае имеется огромное число свободных состояний, которые может занять внешний электрон (рис. 6.9, а).

В некоторых ковалентных кристаллах, например в кремнии и германии, расстояние между атомами таково, что зоны, содержащие валентные электроны (валентные зоны), не перекрываются (рис. 6.9, б и в). Оказывается, что у кремния заполненная валентная зона и следующая за ней более высокая пустая зона разделены запрещённой зоной, шириной $E_g = 1,11$ эВ (при 300 К). У германия ширина соответствующей запрещённой зоны составляет $E_g = 0,66$ эВ (при 300 К).

Для того чтобы через кремний и германий мог протекать электрический ток, в пустой зоне должно иметься некоторое количество электронов. При комнатной температуре количество электронов, попавших в эту зону проводимости за счёт теплового движения, невелико. Проводимость германия и кремния значительно ниже, чем у обычного металла. Поэтому эти кристаллы называют полупроводниками. Если же ши-

рина запрещённой зоны кристалла слишком так велика, что теплового движения недостаточно для её преодоления, то такой кристалл называется диэлектриком (рис. 6.9, в).

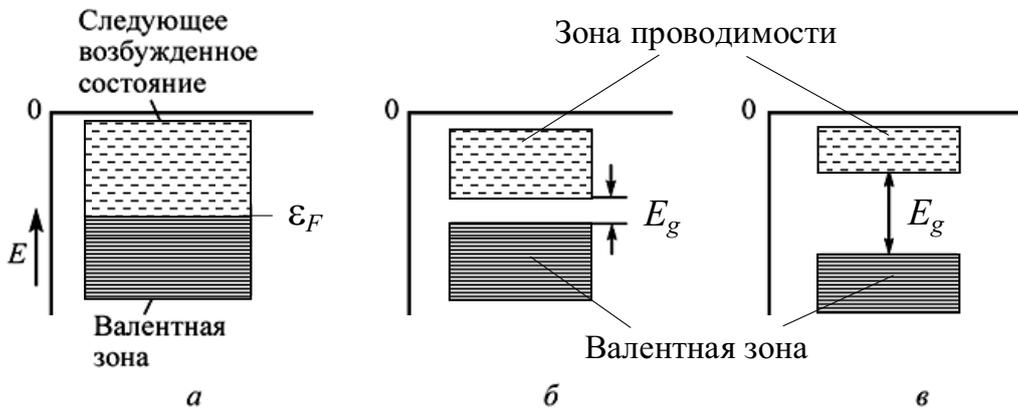


Рис. 6.9. Схематическое сравнение валентной зоны и зоны проводимости: а – проводник; б – полупроводник; в – диэлектрик; $E_g \gg kT$

Согласно распределению Больцмана концентрация свободных электронов n_e в зоне проводимости $\sim \exp(-E_g/kT)$, то при абсолютном нуле температуры чистые кристаллы диэлектриков и даже полупроводников должны обладать бесконечно большим сопротивлением.

На рис. 6.3, а приведены контуры, отвечающие значениям квадрата средней волновой функции валентной зоны германия, а контуры на рис. 6.3, б – квадрату средней волновой функции зоны проводимости.

6.5. Физика полупроводников

Рассмотрим беспримесный (собственный) полупроводник. При тепловом возбуждении электрона, находящегося в валентной зоне полупроводника, он освобождает состояние в валентной зоне и переходит в зону проводимости, образуя там заполненное состояние. Незаполненное состояние, или вакансия, образующееся при этом в валентной зоне, называется дыркой. На рис. 6.10, а показаны электрон, перешедший в зону проводимости, и образованная им дырка. В присутствии внешнего электрического поля ближайший к дырке электрон в валентной зоне попадает в неё, оставляя при этом новую дырку, которую заполнит следующий соседний электрон, и т. д. Таким образом, дырка будет перемещаться в направлении, противоположном направлению движения электронов, и вести себя как носитель положительного заряда. Любая дырка может рассматриваться как электрон проводимости с положительным зарядом.

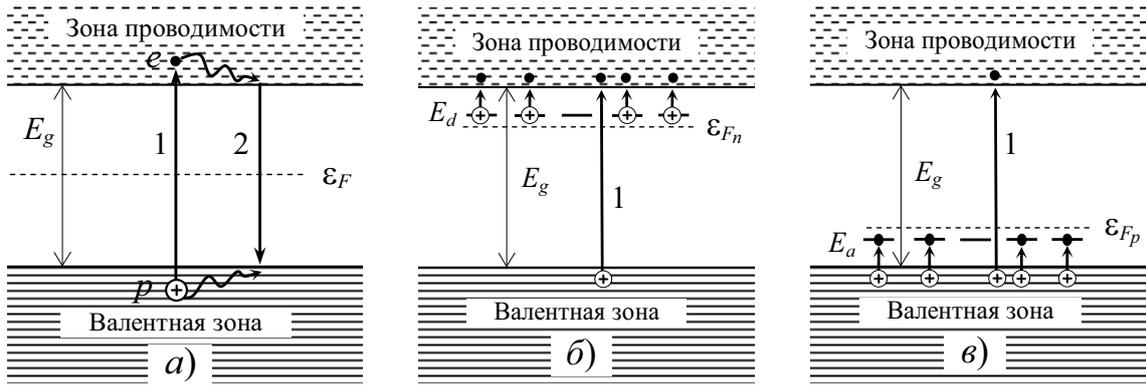


Рис. 6.10. Зонная схема собственного (беспримесного) полупроводника (а). Возбуждённый электрон (●) из валентной зоны, в которой осталась дырка (⊕), перешёл в зону проводимости; б — полупроводник n-типа (электрон с донорного уровня E_d перешёл в зону проводимости); в — полупроводник p-типа (электрон из валентной зоны перешёл на акцепторный уровень E_a); ϵ_F — уровень Ферми

Согласно распределению Больцмана вероятность перехода электрона в результате теплового возбуждения с верхнего края валентной зоны в зону проводимости пропорциональна $\exp(-E_g/kT)$, где E_g — ширина запрещённой зоны.

Для германия при комнатной температуре ($kT = 0,026$ эВ) имеем $E_g/kT = 0,66/0,026 \approx 25$. Несмотря на то, что у германия и кремния при комнатной температуре имеется небольшое число электронов в зоне проводимости, они несравненно лучше проводят ток, чем такой диэлектрик, как алмаз, у которого $E_g \approx 7$ эВ. При температуре $T \sim 30$ К и кремний, и германий также становятся диэлектриками.

В полупроводнике электрон, попадающий за счёт теплового возбуждения в зону проводимости, в конечном счете столкнется с дыркой и возвратится назад в валентную зону (рис. 6.10, а, переходы 1 и 2). При этом скорость уменьшения числа электронов проводимости пропорциональна N^-N^+ , где N^- — число термически возбуждённых электронов, а N^+ — число дырок. Выше мы показали, что скорость рождения пар пропорциональна $\exp(-E_g/kT)$. В тепловом равновесии эти скорости одинаковы, так что

$$N^-N^+ \sim \exp(-E_g/kT).$$

В чистом полупроводнике $N^- = N^+$ и, следовательно,

$$N^- \sim \exp(-E_g/2kT).$$

Поскольку электропроводность σ пропорциональна числу N^- , (точнее $N^- + N^+$) она будет очень быстро увеличиваться с ростом температуры.

Пусть кремниевый образец нагревают от $T' = 273$ К до $T = 283$ К (от 0 до 10°C). Определим, как возрастёт его электропроводность. Отношение

$$\frac{N^{-'}}{N^{-}} = \frac{\exp(-E_g / 2kT')}{\exp(-E_g / 2kT)} = \exp\left[\frac{E_g}{2k}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T'}\right)\right].$$

Таким образом, поскольку $E_g = 1,1$ эВ $= 1,76 \cdot 10^{-19}$ Дж, имеем

$$\frac{N^{-'}}{N^{-}} = \exp\left[\frac{1,76 \cdot 10^{-19}}{2 \cdot 1,38 \cdot 10^{-23}}\left(\frac{1}{273} - \frac{1}{283}\right)\right] = 2,28.$$

Из последнего примера следует, что при повышении температуры на каждые 10 К сопротивление образца из чистого кремния уменьшается приблизительно вдвое, поэтому его можно использовать в качестве очень чувствительного электронного датчика температуры. Такое устройство (изготовленное из чистого полупроводника) называется термистором (терморезистором).

Легирование полупроводников. Если при выращивании кристалла германия в расплав добавляется небольшое количество мышьяка (с валентностью 5), то последний внедряется в решетку кристалла, и четыре из его пяти валентных электронов образуют четыре необходимые ковалентные связи. Оставшийся пятый электрон занимает локальное состояние, расположенное в запрещённой зоне чуть ниже дна зоны проводимости — донорный уровень (для мышьяка $E_d = 0,013$ эВ), так что незначительное тепловое возбуждение может перевести этот электрон в зону проводимости (рис. 6.10, б). Следовательно, при комнатной температуре электронов проводимости будет почти столько же, сколько атомов мышьяка. Обычно электронов проводимости обусловленных примесью оказывается намного больше, чем электронов, попавших в зону проводимости из валентной зоны благодаря тепловому движению (переход 1, рис. 6.10, б). Такой полупроводник называется полупроводником *n*-типа (*n* означает, что носители заряда являются отрицательными, *n* — *negative*).

Германий можно легировать, например, галлием (с валентностью 3). В этом случае атом галлия в решетке кристалла при формировании четырех валентных связей будет присоединять соседний электрон.

В результате в запрещённой зоне недалеко от потолка валентной зоны появляется локальный акцепторный уровень (для галлия $E_a = 0,011$ эВ), на который захватывается электрон из валентной зоны (рис. 6.10, в). Следовательно, в валентной зоне появляется свободная дырка и мы получим полупроводник *p*-типа (*p* означает, что носители заряда являются положительными, *p* — *positive*). При комнатной температуре свободных дырок будет почти столько же, сколько атомов галлия.

Если полупроводник одновременно легирован донорными (N_d) и акцепторными (N_a) примесями примерно в равных количествах, то такой полупроводник называется **компенсированным**.

p-n-переходы. Если между двумя образцами из полупроводников *p*- и *n*-типа создать контакт, то электроны будут переходить из образца *n*-типа в образец *p*-типа, а дырки — в обратном направлении, пока в образцах не сравняются уровни Ферми (рис. 6.11).

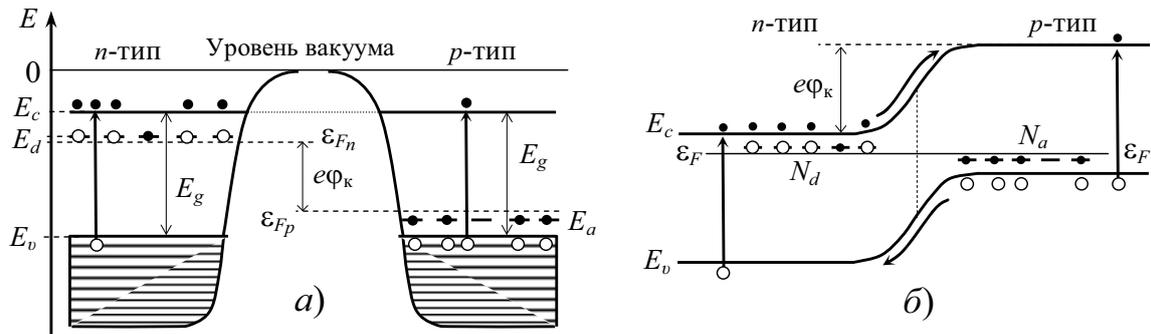


Рис. 6.11. Диаграммы потенциальной энергии полупроводников *n*- и *p*-типа до того, как они были приведены в контакт (а); $e\phi_k = \epsilon_{Fn} - \epsilon_{Fp}$ — расстояние между уровнями Ферми. После приведения полупроводников в контакт (б) происходит разделение зарядов и устанавливается постоянный уровень Ферми ϵ_F для всего полупроводника. Здесь • — электрон; ◦ — дырка

Образец *p*-типа, получивший дополнительные электроны, станет более отрицательным, а образец *n*-типа — более положительным. Обозначим контактную разность потенциалов через ϕ_k .

Между образцами устанавливается контактная разность потенциалов, равная разности исходных уровней Ферми $\phi_k = (\epsilon_{Fn} - \epsilon_{Fp})/e$. Контактная разность потенциалов ϕ_k тем больше, чем сильнее легированы *n*- и *p*-области полупроводника; её максимальное значение близко к ширине запрещённой зоны $(\phi_k)_{\max} = E_g/e$ (рис. 6.11).

Рассмотрим резкий *p-n*-переход, в котором акцепторная область полупроводника легирована сильнее, чем электронная, т. е. $N_a > N_d$ (рис. 6.12, а). Энергетические уровни доноров и акцепторов расположены так близко к зоне проводимости и валентной зоне, что все они практически полностью ионизированы. Обозначим в *n*-области концентрацию основных носителей заряда — электронов n_n и неосновных носителей заряда — дырок p_n , а в *p*-области концентрацию дырок p_p и электронов n_p . Тогда $p_p = N_a$, $n_n = N_d$.

При образовании контакта между полупроводниками с разным типом электропроводности в области *p-n*-перехода будет существовать большой градиент концентрации электронов и дырок. В результате

начнётся диффузия электронов из n -области в p -область и дырок из p -области в n -область. Возникновение диффузионных потоков приведёт к разделению зарядов, вследствие чего появится положительный объёмный заряд в n -области, примыкающей к переходу, и отрицательный — в p -области около перехода (рис. 6.12, б, в). Эти объёмные заряды, шириной $L_0 = L_n + L_p$, в области контакта создадут сильное электрическое поле, направленное от n -области к p -области и препятствующее движению электронов и дырок.

В результате установится равновесное состояние, которое будет характеризоваться постоянством уровня Ферми ε_F для всего полупроводника, а в области перехода, где имеется электрическое поле, зоны энергии будут искривлены (рис. 6.12, з). Искривление зон энергии вызовет перераспределение концентрации электронов и дырок (рис. 6.12, д) и изменит ход электростатического потенциала в области p - n -перехода (рис. 6.12, е).

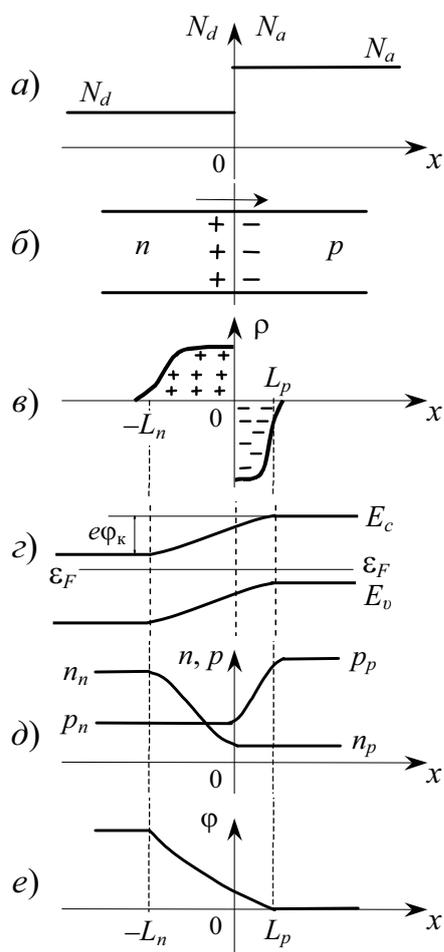


Рис. 6.12. Распределение донорных (N_d) и акцепторных (N_a) примесей (а); разделение заряда и возникновение электрического поля (б); распределение объёмного заряда (в), где $L_0 = L_n + L_p$ — ширина области объёмного заряда; зонная структура p - n -перехода (з); распределение концентрации свободных электронов (n_n, n_p) и дырок (p_n, p_p) вдоль оси x (д); изменение потенциала φ в контакте электронного и дырочного полупроводников

Как следует из рис. 6.12, основные носители заряда (n_n и p_p) при переходе через контакт должны преодолевать потенциальный барьер высотой $-e\varphi_k$ (диффузионный ток). Переход неосновных носителей

заряда (n_p и p_n) совершается под действием электрического поля p - n -перехода (дрейфовый ток). В состоянии термодинамического равновесия диффузионный ток основных носителей заряда уравновешен дрейфовым током неосновных носителей заряда и суммарный ток через p - n -переход равен нулю.

Рассмотрим ток, вызванный перемещением дырок и текущий в обоих направлениях через p - n -переход.

Величина дрейфового дырочного тока, протекающего, как показано на рис. 6.12, z и d , слева направо ($I_{\text{прав}}$), пропорциональна концентрации дырок p_n в образце n -типа. При пересечении дырками поверхности контакта они будут ускоряться разностью потенциалов ε_k . Таким образом,

$$I_{\text{прав}} = Cp_n,$$

где C — коэффициент пропорциональности. Диффузионный ток дырок справа налево ($I_{\text{лев}}$) пропорционален произведению p_p на долю дырок, которые могут преодолеть потенциальный барьер высотой $e\varphi_k$. Эта доля определяется с помощью статистической физики и равна $\exp(-e\varphi_k/kT)$. Следовательно,

$$I_{\text{лев}} = Cp_p \cdot \exp(-e\varphi_k/kT).$$

Поскольку в состоянии термодинамического равновесия $I_{\text{лев}} = I_{\text{прав}} = I_0$, мы имеем

$$p_n = p_p \cdot \exp(-e\varphi_k/kT)$$

и

$$I_0 = Cp_p \cdot \exp(-e\varphi_k/kT).$$

Приложим теперь к p - n -переходу внешнее напряжение V , минус — к электронному полупроводнику, а плюс — дырочному, т. е. напряжение приложено в прямом направлении (рис. 6.13, a). Тогда разность потенциалов между образцом n -типа и образцом p -типа станет равной $(\varphi_k - V)$, и дырочный ток, текущий налево, можно записать в виде

$$\begin{aligned} I_{\text{лев}} &= Cp_p \cdot \exp[-e(\varphi_k - V)/kT] = Cp_p \cdot \exp(-e\varphi_k/kT) \cdot \exp(eV/kT), \\ I_{\text{лев}} &= I_0 \cdot \exp(eV/kT). \end{aligned}$$

Текущий направо дрейфовый дырочный ток по-прежнему равен I_0 , поскольку величина p_n не изменилась. Следовательно, результирующий ток в p - n -переходе равен разности токов основных и неосновных носителей заряда и направленный от p -области к n -области, т. е.

$$I = I_{\text{лев}} - I_{\text{прав}} = I_0[\exp(eV/kT) - 1] \text{ (диодное уравнение).}$$

Аналогичное уравнение можно получить и для электронного тока.

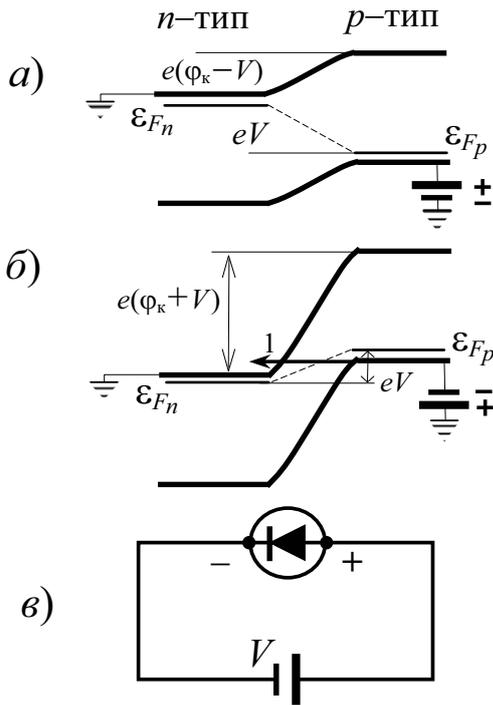


Рис. 6.13. Напряжение V , приложенное к p - n -переходу в прямом направлении, понижает потенциальный барьер (а) и повышает барьер, если напряжение приложено в обратном направлении (б). Уровни Ферми в полупроводниках n - и p -типа смещены на величину eV ; в – общее схематическое представление p - n -перехода (диода)

Этот результирующий дырочный ток течёт в образец n -типа, где дырки в конечном итоге рекомбинируют (излучательно или безызлучательно) с электронами проводимости. Потери электронов при рекомбинации пополняются за счёт тока электронов из внешнего источника напряжения, как показано на рис. 6.13, в. На рис. 6.14 приведена зависимость I от V , вычисленная по формуле

$$I = I_0[\exp(eV/kT) - 1].$$

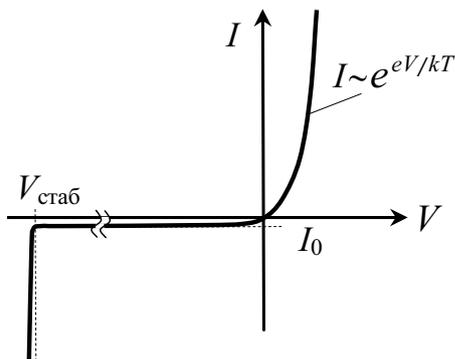


Рис. 6.14. Вольт-амперная характеристика идеального p - n -перехода. Зависимость тока I от напряжения V , соответствующая выражению $I = I_0[\exp(eV/kT) - 1]$. При обратном напряжении $V_{\text{стаб}}$ происходит пробой p - n -перехода и лавинообразное увеличение тока

Следует заметить, что при небольшом положительном напряжении ($\sim 0,1$ В) ток экспоненциально возрастает и, как правило, во много раз превосходит величину I_0 .

Если напряжение приложено к p - n -переходу в обратном направлении, то высота потенциального барьера увеличивается (рис. 6.13, б). В этом случае величина диффузионного тока $\sim \exp(-eV/kT) \approx 0$. Следовательно, максимальный ток равен дрейфовому току I_0 . Устройство, обла-

дающее такой нелинейной характеристикой, называется диодом. Основной частью любого радиоприёмника с амплитудной модуляцией (АМ) является диодный детектор, которым обычно служит $p-n$ -переход.

При увеличении обратного напряжения на $p-n$ -переходе от нескольких вольт до нескольких сотен вольт (в зависимости от степени легирования и материала полупроводника) в некоторый момент происходит лавинный пробой $p-n$ -перехода и ток резко возрастает (рис. 6.14) до значения, ограничиваемого только внешней цепью перехода.

Пробой $p-n$ -перехода может быть обусловлен тем, что сильное электрическое поле вызывает такой наклон энергетических зон, при котором в результате туннельного перехода (переход 1, рис. 6.13, б) сильно увеличивается концентрация свободных носителей заряда и ток через переход резко возрастает (з и н е р о в с к и й пробой). Другой механизм пробоя связан с тем, что свободные носители заряда могут создаваться в результате разрыва валентных связей за счёт кинетической энергии носителя заряда, полученной им от электрического поля при прохождении запирающего слоя. Возникающие свободные носители заряда в свою очередь ускоряются полем на длине свободного пробега и также могут принять участие в генерации электронно-дырочных пар. Происходит лавинное нарастание обратного тока, благодаря чему этот тип пробоя назван л а в и н н ы м (см. рис. 6.16, б).

Если внешняя цепь ограничивает ток пробоя значением, при котором выделяемое им тепло невелико, то пробой не вызывает разрушения диода. Диоды в таком режиме (стабилитроны) используются как устройства для задания опорного напряжения в схемах стабилизации напряжения. Например, благодаря схемам стабилизации, современные телевизоры устойчиво работают при изменении напряжения в сети от 140 до 260 вольт.

Ток электронов проводимости, обусловленный концентрациями n_p и n_n отрицательных носителей, соответствует тому же результату: $I = I_0[\exp(eV/kT) - 1]$. Если принять во внимание наличие отрицательных носителей заряда, то I_0 представляет собой максимальный ток, создаваемый носителями обоих знаков, при обратном напряжении.

Предположим, что $p-n$ -переход находится при 0°C и при прямом напряжении 0,1 В его сопротивление равно $R_{\text{прям}} = 10$ Ом. Определим сопротивление перехода, если поменять полярность напряжения. В соответствии с формулой $I = I_0[\exp(eV/kT) - 1]$ сопротивление перехода обратно пропорционально величине $[\exp(eV/kT) - 1]$. Отношение сопротивления в обратном направлении к сопротивлению в прямом направлении при значении приложенного напряжения V_1 запишется в виде

$$\frac{R_{\text{обр}}}{R_{\text{прям}}} = \frac{|\exp(eV_1/kT) - 1|}{|\exp(-eV_1/kT) - 1|},$$

где $eV_1 = 0,1$ эВ, а $kT = 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 273$ Дж = 0,0236 эВ.

Таким образом, $eV_1/kT = 4,237$, и

$$\frac{R_{\text{обр}}}{R_{\text{прям}}} = \frac{|\exp(4,237) - 1|}{|\exp(-4,237) - 1|} = 69,2,$$

откуда находим $R_{\text{обр}} = 692$ Ом.

Поглощение полупроводником квантов электромагнитного излучения (фотонов) может привести к возникновению свободных носителей заряда — электронов и (или) дырок. Это явление называется внутренним фотоэффектом. Внутренний фотоэффект является первичным актом в явлениях фотоЭДС, фотопроводимости, фотомагнитоэлектрических и других эффектов в полупроводниках.

Солнечная батарея — устройство, непосредственно преобразующее энергию солнечного излучения в электрическую. Если на область перехода между двумя образцами n - и p -типа направить свет, то электроны валентной зоны будут поглощать фотоны и переходить из валентной зоны в зону проводимости. Каждый такой фотон создает пару электрон–дырка (см. рис. 6.15). Под действием электрического поля в области n - p -перехода вновь образованные дырки будут перемещаться в образец p -типа, а электроны — в образец n -типа. Эти дополнительные носители заряда могут перемещаться по замкнутой внешней цепи.

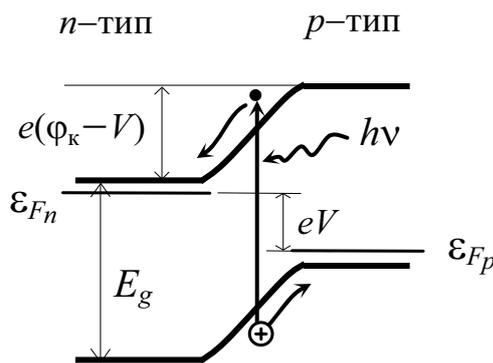


Рис. 6.15. Энергетическая схема p - n -перехода при освещении его в области фундаментального поглощения ($h\nu \geq E_g$). Под действием внутреннего поля в p - n -переходе созданные светом носители заряда (электроны и дырки) движутся в противоположных направлениях. Возникает фотоЭДС, и если p - n -переход соединен с внешней цепью, то по цепи протекает фототок

Таким образом, свет можно преобразовывать непосредственно в электрическую энергию. Кремниевый элемент солнечной батареи ведёт себя как обычная электрическая батарейка напряжением $\approx 0,5$ В, причём КПД преобразования солнечного света в электричество достигает 15 %. Солнечные батареи используются в качестве источников энергии на космических кораблях.

Если стоимость выработки 1 кВт энергии солнечной батареей удастся сделать сравнимой со стоимостью выработки 1 кВт на обычных электростанциях, то тогда их можно будет использовать в промышленных масштабах для получения экологически чистой электроэнергии.

Фотодиоды. Если к элементу солнечной батареи приложено обратное напряжение, то под действием света слабый в обычных условиях дрейфовый ток I_0 сильно возрастает, так как при этом образуются дополнительные носители заряда (рис. 6.15).

Фототок пропорционален количеству фотонов, падающих на фотоэлемент. Такое устройство, чрезвычайно чувствительное к интенсивности падающего на него света, используется во многих приборах для регистрации изменений интенсивности света.

Светодиоды. Ярко-красные светящиеся точки в индикаторных устройствах микрокалькуляторов, наручных часов и т. п. создаются устройствами, называемыми светодиодами. Эти устройства сродни твёрдотельным лазерам (см. п. 6.8).

Светодиод — полупроводниковый диод, излучающий в результате электролюминесценции*) свет при пропускании тока через p - n -переход в прямом или обратном направлении. Излучательная рекомбинация в светодиодах осуществляется преимущественно в прямозонных полупроводниках (например, GaAs).

Основные механизмы возбуждения светодиода — инжекция носителей заряда в активную область p - n -перехода и ударная ионизация (лавинный пробой).

Инжекционный механизм наиболее эффективен и имеет место при прямом смещении p - n -перехода (рис. 6.16, а). В этом случае в результате дрейфа основных носителей в области p - n -перехода электроны и дырки рекомбинируют с испусканием кванта света (излучательная рекомбинация). Потери электронов и дырок пополняются за счёт внешнего источника тока. В некоторых структурах эффективность инжекционного механизма преобразования электрической энергии в видимый свет приближается к 100 %.

*) Электролюминесценцией (ЭЛ) называется люминесценция, при которой светящееся тело черпает энергию непосредственно из электрического поля. ЭЛ твёрдых тел была открыта в 1923 г. О.В. Лосевым при пропускании тока через контакт металл—полупроводник. Позднее электролюминесценция наблюдалась на p - n - и гетеропереходах.

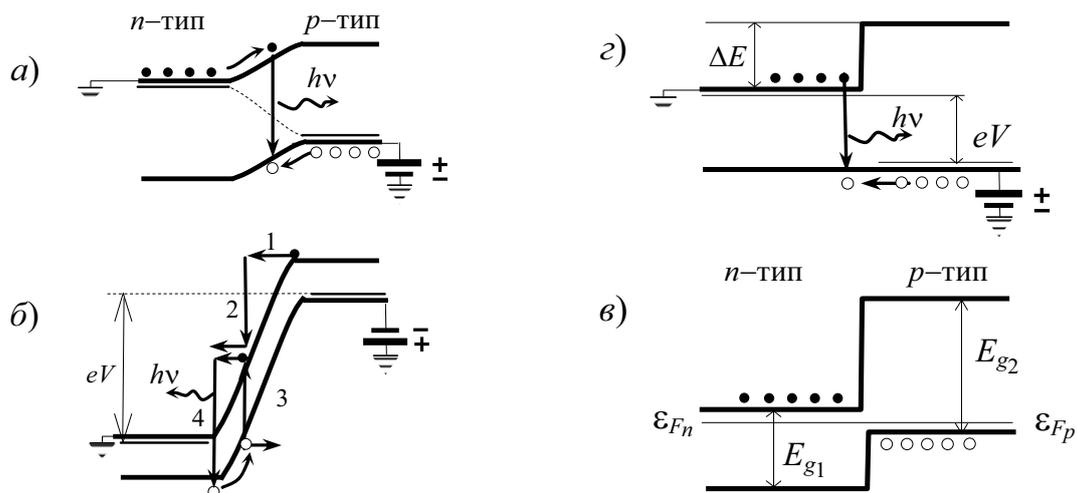


Рис. 6.16. Схема инжекционного механизма излучения p - n -перехода при прямом смещении (а) и механизма ударной ионизации при обратном смещении V (б): 1 — «разогретый» полем электрон; 2 — потеря энергии электроном в результате неупругого столкновения с электроном валентной зоны; 3 — образование электронно-дырочной пары; 4 — излучение фотона. Идеальная зонная схема для гетероперехода: в — в условиях равновесия; г — при прямом смещении V (инжекционный механизм излучения). Здесь • — электрон; ◦ — дырка

Механизм ударной ионизации имеет место при обратном смещении p - n -перехода до напряжения лавинного электрического пробоя (см. рис. 6.14). Если неосновной носитель, например электрон, участвующий в токе насыщения ускорится электрическим полем p - n -перехода до кинетической энергии, равной или превышающей $3/2E_g$ (рис. 6.16, б, переход 1), то он сможет передать часть своей энергии электрону из валентной зоны и забросить его в зону проводимости (переход 3). При этом событии образуется электронно-дырочная пара, а первичный электрон термализуется на дно зоны проводимости (переход 2). Теперь имеется два электрона и дырка, которые могут «разогреваться» полем p - n -перехода. Этот процесс будет повторяться много раз, развиваясь как лавина. Часть электронно-дырочных пар рекомбинируют с испусканием фотона (переход 4). Этот многостадийный механизм преобразования электрической энергии в световую менее эффективен, чем инжекционный.

Если n - и p -область перехода изготовлены из различных полупроводников (рис. 6.16, в), то такой переход называется гетеропереходом (гетероструктурой). Отличие от обычного p - n -перехода более тонко в том случае, когда полупроводники взаиморастворимы, а переход плавный. Переходы последнего типа иногда называют квазигомопереходами. В настоящее время разработаны технологии изготовления

практически «идеальных» гетеропереходов, не имеющих дефектов на границе раздела.

Одной из причин обращения к гетеропереходам является возможность получить высокоэффективную инжекцию неосновных носителей в узкозонный полупроводник. Это свойство гетеропереходов легко понять из рассмотрения рис. 6.16, г. Когда прямое смещение выравнивает валентную зону, дырки инжектируются в n -область, где излучательно рекомбинируют. Так как энергия образовавшегося кванта $h\nu < E_{g2}$, то он практически без поглощения покидает переход через широкозонный полупроводник. Инъекции же электронов из n -области в p -область препятствует барьер $\Delta E = (E_{g2} - E_{g1})$. Эффективность преобразования электрической энергии в излучение в гетеропереходах приближается к 100 %.

Светодиоды характеризуются высокой яркостью (до 10^5 кд/м²), силой света (до десятков кандел), силой излучения (сотни мВт/ср), высоким внешним квантовым выходом излучения (до 50 %), широким спектральным диапазоном ($\lambda_{\max} = 7...0,35$ мкм), высоким быстродействием (до единиц наносекунд), совместимостью по входным характеристикам с транзисторными микросхемами и возможностью их монолитной интеграции, лёгкостью ВЧ-модуляции излучения путём модуляции тока накачки (до сотен мегагерц), низковольтностью электропитания (1,5...4 В), надёжностью и большим сроком службы (до сотен тысяч часов).

Светодиоды могут иметь усложнённую конструкцию, повышающую эффективность ввода излучения в оптоволокно, если они предназначены для использования в специальных целях, например в волоконно-оптических линиях связи.

Транзистор. На рис. 6.17 представлен p - n - p -переход. Соответствующее устройство называется транзистором. Его можно рассматривать как p - n переход (см. рис. 6.13), к которому слева добавлена область p -типа (называемая коллектором).

На рис. 6.17 к «диодной части» приложено прямое напряжение V_b , что приводит к большому дырочному току из левой области p -типа (называемой эмиттером) в область n -типа (база). «Секрет» транзистора состоит в том, что база изготавливается тонкой, чтобы большая часть дырок диффундировала через неё в коллектор. К коллектору прикладывается отрицательное по отношению к базе напряжение, чтобы усилить движение к нему носителей положительного заряда (дырок). В типичном транзисторе лишь ~1 % тока эмиттера отводится в электрическую цепь базы. Остальные 99 % тока идут в цепь коллектора через вывод с.

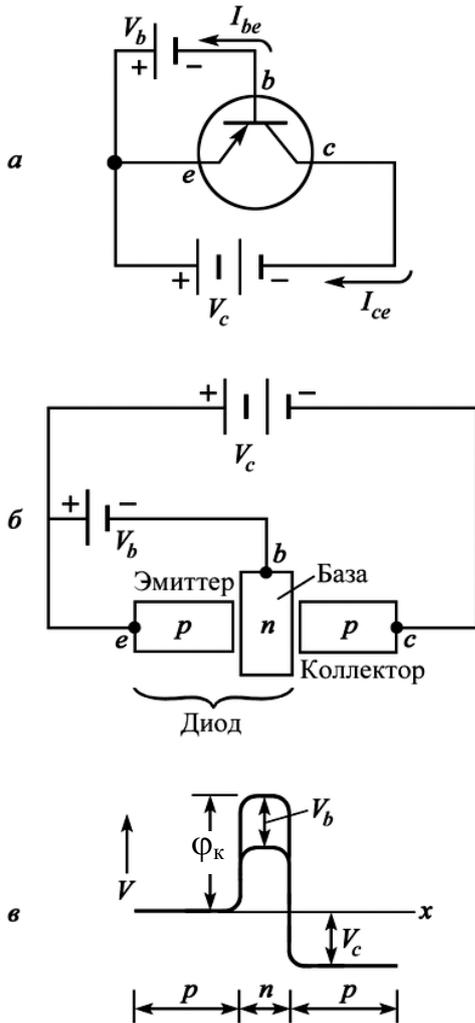


Рис. 6.17. Схематическое представление $p-n-p$ -транзистора (а); б – схема соединения полупроводников n - и p -типа; в – изменение потенциала внутри транзистора; если напряжение V_b отсутствует, то контактная разность потенциалов между базой и эмиттером равна ϕ_k

Отношение тока коллектора к току базы называется коэффициентом усиления по току β :

$$\beta \equiv I_c / I_b.$$

В типичных транзисторах, имеющих $\beta = 100$, небольшой входной ток в цепи базы позволяет управлять в 100 раз большим выходным током в цепи коллектора. Следовательно, транзисторы можно использовать для усиления, т. е. для преобразования малых сигналов в большие.

Например, ток I_{be} на рис. 6.17 может представлять собой слабый ток в антенне радиоприёмника. В этом случае ток I_{ce} должен повторять изменения во времени тока I_{be} , но быть в 100 раз больше. Следует заметить, что $n-p-n$ -транзисторы имеют те же характеристики, что и $p-n-p$ -транзисторы, но они отличаются тем, что в случае $n-p-n$ -транзисторов основными носителями зарядов являются электроны, а не дырки.

Интегральные схемы. Появление множества недорогих твёрдотельных приборов привело к перевороту в области электроники. Разработ-

ка интегральных схем произвела в этой области вторую революцию. Даже для электронных микрокалькуляторов требуются тысячи транзисторов, соединённых в сложные схемы. Однако все эти транзисторы вместе с их многочисленными электрическими цепями и соединениями умещаются на тонкой плате площадью около 1 см^2 . Лучшим достижением в настоящее время являются 20000 твёрдых элементов, размещённых на площади около $0,4 \text{ см}^2$. (Это уже соизмеримо с плотностью нейронов в человеческом мозге.)

Соединительные «провода» настолько малы, что их можно увидеть только в микроскоп. Тонкие слои кристалла наносятся на плату с помощью оптических масок (схема уменьшается фотоспособом и проецируется на светочувствительную маску). Производство интегральных схем обходится в тысячи раз дешевле, чем производство вытесненных ими вакуумных приборов. При этом на несколько порядков были улучшены такие характеристики, как масса, габариты, надёжность и потребляемая мощность.

Разработанные в последние годы наноэлектронные элементы по своей миниатюрности, быстрдействию и потребляемой мощности составляют серьёзную конкуренцию традиционным полупроводниковым транзисторам и интегральным микросхемам на их основе как главным элементам информационных систем.

Уже сегодня техника вплотную приблизилась к теоретической возможности запоминать и передавать 1 бит информации с помощью одного электрона, локализация которого в пространстве может быть задана одним атомом. Это позволяет уменьшить размеры одного транзистора приблизительно до 10 нм , а рабочие частоты увеличить до 10^{12} Гц .

6.6. Сверхтекучесть

Сверхтекучесть жидкого гелия – это ещё одно необычное квантово-механическое явление, имеющее место при температуре, близкой к абсолютному нулю. Если газообразный гелий охладить, то при температуре $4,2 \text{ К}$ он сжижается. Дальнейшее охлаждение уже жидкого гелия приводит к тому, что при температуре $2,2 \text{ К}$ его свойства резко меняются (это относится к изотопу ^4He ; гелий-3 ведет себя как обычная жидкость). При этом происходят макроскопические явления, совершенно не укладывающиеся в рамки обычных представлений. На-

пример, сосуд, частично заполненный этой странной модификацией жидкого гелия (называемой сверхтекучим гелием II) и оставленный незакрытым, вскоре опорожняется сам собой. Объясняется это тем, что жидкий гелий поднимается по внутренней стенке сосуда (независимо от её высоты) и переливается наружу. По той же причине может происходить и обратное явление (рис. 6.18).

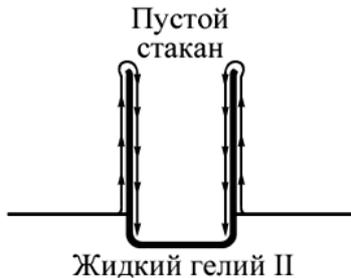


Рис. 6.18. Стрелками показана поверхностная плёнка жидкого гелия II, перетекающая в пустой сосуд. Поверхность действует как сифон

Если пустой стакан частично погрузить в жидкий гелий, то он быстро заполнится гелием до того же уровня, что и уровень жидкости снаружи. Если далее понижать температуру ниже 2,2 К, то количество сверхтекучей компоненты увеличивается. При абсолютном нуле должна остаться лишь сверхтекучая компонента.

Другим необычным свойством чистой сверхтекучей жидкости является то, что она не передает усилия на другие тела. Бьющий из брандспойта под большим давлением поток такой жидкости не смог бы опрокинуть даже поставленную на ребро монету. Жидкость свободно обтекала бы монету, не оказывая на неё никакого усилия. Сверхтекучая компонента жидкого гелия имеет нулевую вязкость. Но почему все-таки вязкость равна нулю? Атомы гелия не подчиняются принципу Паули, так как их спин равен нулю. Это относится только к изотопу ${}^4\text{He}$, тогда как спин атома ${}^3\text{He}$ равен $\frac{1}{2}$. То, что атомы ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ подчиняются разным статистикам, проявляется в коренном различии их свойств при низких температурах. Частицы с нулевым спином ${}^4\text{He}$ могут находиться в одном и том же состоянии в любом количестве; эти частицы подчиняются, так называемой, статистике Бозе—Эйнштейна. Все атомы сверхтекучего гелия находятся в основном состоянии. Чтобы такая жидкость имела отличную от нуля вязкость, её атомы должны совершать переходы в состояния с более высокой энергией, а энергии для этого у них нет.

6.7. Квантовые полупроводниковые структуры в электронике

Интегральные схемы современной полупроводниковой электроники становятся всё более сложными и объединяют всё большее число элементов. Удаётся увеличивать плотность размещения транзисторов, диодов и других элементов за счёт уменьшения их размеров. В недалеком будущем эти размеры станут порядка нескольких долей микрона, и процессы в таких приборах уже являются принципиально квантовыми.

Накоплен большой опыт в разработке приборов, действие которых основано на квантово-механических принципах. Укладывая атомы с точностью до одного-двух слоёв, удаётся создавать искусственные кристаллы, молекулы и даже атомы с заданными свойствами. Такие полупроводниковые структуры имеют размеры в несколько нанометров. Хотя указанные размеры ещё превышают размеры настоящих атомов, электроны в этих структурах ведут себя как квантовые объекты. Можно выделить три основных типа микроструктур: квантовые ямы, нити и точки — искусственные атомы. Применение этих структур открывает новые возможности электронной инженерии.

Электрон подобен волне, но вместе с тем сохраняет признаки обычной частицы. Он имеет строго определённую массу, заряд электрона также фиксирован. Подобно классической частице, электрон обладает импульсом и энергией.

Когда движение электрона происходит в ограниченной области, его энергия имеет вполне определённые, дискретные значения.

В главе 3 показано, что решение стационарного уравнения Шрёдингера для частицы, находящейся в прямоугольной потенциальной яме возможно, только если энергия E принадлежит дискретному набору значений. В этом случае говорят, что спектр энергий квантован. Эти значения энергий равны

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2,$$

где $n = 1, 2, 3 \dots$ — целое число.

Минимальная энергия частицы, находящейся в яме, не равна нулю. Квантовое состояние с наименьшей энергией $\pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$ (в данном случае при $n = 1$) называется основным состоянием.

В физике конденсированных сред (диэлектрики, полупроводники, металлы) вводится понятие эффективной массы. Эффективная масса — величина, имеющая размерность массы и характеризующая динамические свойства квазичастиц. Например, движение электрона

проводимости в кристалле под действием внешней силы \mathbf{F} и сил со стороны кристаллической решётки в ряде случаев может быть описано как движение свободного электрона, на который действует только силы \mathbf{F} (закон Ньютона), но с эффективной массой m^* , отличной от массы m свободного электрона. Это отличие отражает взаимодействие электрона проводимости с решёткой. В простейшем случае изотропной зависимости энергии электрона E от его квазиимпульса p эффективная масса — скалярная величина, определяемая соотношением:

$$1/m^* = \partial^2 E / \partial p^2.$$

Если зависимость $E(p)$ (дисперсии закон) анизотропна, то эффективная масса представляет собой тензор:

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{i,j} = \frac{\partial^2 E}{\partial p_i \partial p_j}.$$

Это означает, что ускорение электрона \mathbf{a} в кристаллической решётке в общем случае направлено не параллельно внешней силе \mathbf{F} . Оно может быть направлено даже антипараллельно \mathbf{F} , что соответствует отрицательному значению эффективной массы. Для электронов с отрицательной эффективной массой оказалось удобным ввести в рассмотрение положительно заряженные квазичастицы — дырки с положительной эффективной массой.

Понятие эффективной массы обобщают для других типов квазичастиц (фононов, фотонов, экситонов и др.).

В яме шириной $a = 4$ нм, $E_1 = 0,02$ эВ. В квантовой яме эффективная масса m^* электрона может быть в десять раз меньше массы m свободного электрона^{*)}. Тогда при той же ширине ямы получим $E_1 = 0,2$ эВ. Эта величина и определяет характерный масштаб электронных энергий в квантовых структурах.

Простейшая квантовая структура, в которой движение электрона ограничено в одном направлении — это тонкая пленка или просто достаточно тонкий слой полупроводника. У одних полупроводников запрещённые зоны широкие, а у других более узкие. Рассмотрим контакт двух полупроводников с различными запрещёнными зонами — гетероструктуру (рис. 6.19). Для электронов, движущихся в узкозонном полупроводнике и имеющих энергию меньше E_{c2} , граница будет играть роль потенциального барьера. Два гетероперехода ограничивают движение электрона с двух сторон и образуют потенциальную яму.

^{*)} Например, эффективная масса электрона m^* в арсениде галлия (GaAs) равна $0,07m$ свободного электрона.

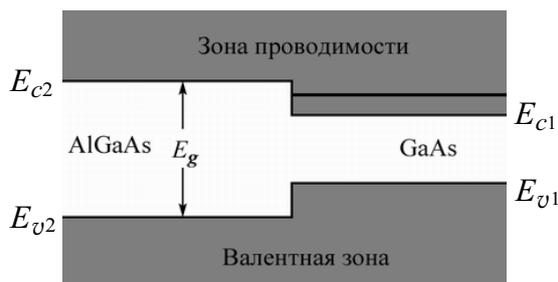


Рис. 6.19. Энергетические зоны на границе двух полупроводников – гетероструктуре: E_c и E_v – границы зоны проводимости и валентной зоны; E_g – ширина запрещённой зоны. Электрон с энергией меньше E_{c2} может находиться только справа от границы

Квантовые ямы создают, помещая тонкий слой полупроводника с узкой запрещённой зоной между двумя слоями материала с более широкой запрещённой зоной. В результате электрон оказывается «запертым» в одном направлении, что и приводит к квантовой энергии поперечного движения. В двух других направлениях движение электронов будет свободным – электронный газ в квантовой яме становится двумерным. Можно приготовить и структуру, содержащую квантовый барьер, для чего помещают тонкий слой полупроводника с широкой запрещённой зоной между двумя полупроводниками с узкой запрещённой зоной.

Для изготовления подобных структур используют метод молекулярно-лучевой эпитаксии. Тонкий слой полупроводника получается осаждением атомов или молекул на тщательно очищенной подложке. Несколько потоков атомов, которые получают испарением вещества из отдельных нагретых источников, одновременно летят на подложку. Выращивание структуры производят в высоком вакууме. Весь процесс управляется компьютером, химический состав и кристаллическая структура выращиваемого слоя контролируются в процессе роста. Метод молекулярно-лучевой эпитаксии позволяет выращивать совершенные монокристаллические слои толщиной в несколько периодов решётки (период кристаллической решетки составляет около 2 \AA).

Чрезвычайно важно, чтобы периоды кристаллических решеток двух соседних слоев, имеющих различный химический состав, были почти одинаковыми. Тогда слои будут точно следовать друг за другом и кристаллическая решётка выращенной структуры не будет содержать дефектов (локальных уровней в запрещённой зоне). С помощью метода молекулярно-лучевой эпитаксии удаётся получить очень резкую (с точностью до монослоя) границу между двумя соседними слоями, причем поверхность получается гладкой на атомном уровне. Квантовые структуры можно выращивать из различных материалов, однако наиболее удачной парой для выращивания квантовых ям являются полупроводник GaAs – арсенид галлия – и твердый раствор $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, в котором часть атомов галлия замещена атомами алюминия. Величина x –

это доля атомов галлия, замещённых атомами алюминия, обычно она изменяется в пределах от 0,15 до 0,35. Ширина запрещённой зоны в арсениде галлия составляет 1,43 эВ (при $T = 300$ К), а в твердом растворе $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ она растёт с увеличением x . Так, при $x = 1$, т. е. в соединении AlAs , ширина запрещённой зоны равна 2,14 эВ (при $T = 300$ К). Чтобы вырастить квантовую яму, необходимо во время роста менять химический состав атомов, летящих на растущий слой. Сначала нужно вырастить слой полупроводника с широкой запрещённой зоной, т. е. $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Энергетическая схема такой идеальной квантовой ямы приведена на рис. 6.20. Эта яма имеет глубину несколько десятых долей электронвольт. В ней находятся только два дискретных уровня, а волновые функции на границе ямы не обращаются в нуль. Значит, электрон можно обнаружить и за пределами ямы, в области, где полная энергия меньше потенциальной (кинетическая энергия отрицательна).

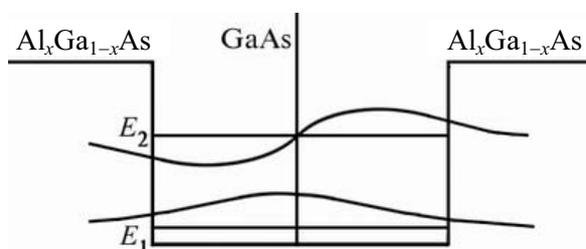


Рис. 6.20. Квантовая яма, сформированная в слое полупроводника с узкой запрещённой зоной, заключённом между двумя полупроводниками, обладающими более широкой запрещённой зоной

Разработано несколько способов получения квантовых точек и нитей. Эти структуры можно сформировать, например, на границе раздела двух полупроводников, где находится двумерный электронный газ. Это можно сделать, если нанести дополнительные барьеры, ограничивающие движение электронов ещё в одном или двух направлениях. Квантовые нити формируются в нижней точке V -образной канавки, образованной на полупроводниковой подложке. Если в основание этой канавки осадить полупроводник с меньшей шириной запрещённой зоны, то электроны этого полупроводника будут заперты в двух направлениях.

На рис. 6.21 показаны квантовые точки, созданные на границе раздела арсенида галлия и арсенида алюминия-галлия. В процессе роста в полупроводник $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ были введены дополнительные примесные атомы. Электроны с этих атомов уходят в полупроводник GaAs , т. е. в область с меньшей энергией. Но они не могут уйти слишком далеко, так как притягиваются к покинутым ими атомами примеси, получившим положительный заряд. Практически все электроны сосредоточиваются у самой гетерограницы со стороны GaAs и образуют двумерный газ. Процесс формирования квантовых точек начинается с нанесения на поверхность $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ряда масок, каждая из которых имеет форму круга.

После этого производится глубокое травление, при котором удаляется весь слой $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и частично слой GaAs (рис. 6.21).

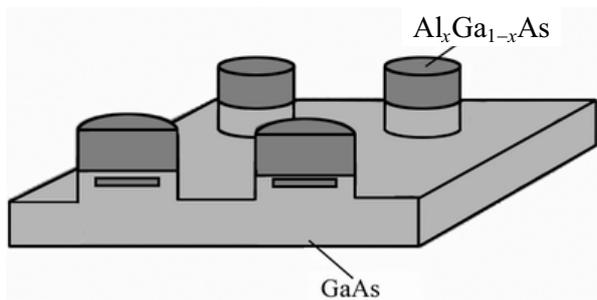


Рис. 6.21. Квантовые точки, сформированные в двумерном электронном газе на границе двух полупроводников

В результате электроны оказываются запертыми в образовавшихся цилиндрах (на рис. 6.21 область, где находятся электроны, — маленький прямоугольник в цилиндре). Диаметры цилиндров имеют порядок 500 нм.

В квантовой точке движение ограничено в трёх направлениях и энергетический спектр полностью дискретный, как в атоме. Поэтому квантовые точки называют ещё искусственными атомами, хотя каждая такая точка состоит из тысяч или даже сотен тысяч настоящих атомов. Размеры квантовых точек (можно говорить также о квантовых ящиках) порядка нескольких нанометров. Подобно настоящему атому, квантовая точка может содержать один или несколько свободных электронов. Если один электрон, то это как бы искусственный атом водорода, если два — атом гелия и т. д.

Кроме простого нанесения рисунка на поверхность полупроводника и травления, для создания квантовых точек можно использовать естественное свойство материала образовывать маленькие островки в процессе роста. Такие островки могут, например, самопроизвольно образоваться на поверхности растущего кристаллического слоя. Существуют и другие технологии приготовления квантовых ям, нитей и точек, которые на первый взгляд кажутся очень простыми. Не нужно, однако, забывать, что речь идёт о необычных масштабах — все фигурирующие здесь размеры значительно меньше длины световой волны.

Большинство способов изготовления квантовых нитей основывается на том, что в системе с двумерным электронным газом (как правило, на основе гетероструктур) тем или иным способом ограничивается движение электронов ещё в одном из направлений. Для этого есть несколько способов.

Эти структуры можно сформировать, например, на границе раздела двух полупроводников, где находится двумерный электронный газ. Это можно сделать, если нанести дополнительные барьеры, ограничивающие движение электронов ещё в одном или двух направлениях. Квантовые нити формируются в нижней точке *V*-образной канавки, образованной на

полупроводниковой подложке. Если в основание этой канавки осадить полупроводник с меньшей шириной запрещённой зоны, то электроны этого полупроводника будут заперты в двух направлениях. Наиболее перспективным методом сейчас выглядит это непосредственное «вырезание» узкой полоски с помощью литографической техники (рис. 6.22, а).

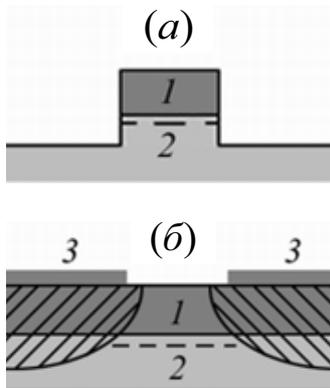


Рис. 6.22. Полупроводниковые гетероструктуры с квантовыми нитями, полученные с помощью субмикронной литографии за счёт вытравливания узкой полоски из самой структуры (а) или щели в затворе Шоттки (б): 1 – полупроводник с широкой запрещённой зоной (например, $Al_xGa_{1-x}As$); 2 – полупроводник с узкой запрещённой зоной (например, $GaAs$); 3 – металлический затвор. Образующийся вблизи гетерограницы узкий электронный канал показан штриховой линией. Заштрихованы области обеднения электронами

При этом для получения электронных нитей шириной в сотни ангстрем, где квантование энергий электронов будет заметным, необязательно делать полоски именно такой ширины, что требует литографической техники сверхвысокого разрешения. Дело в том, что на боковых границах вытравленной полоски, как и на свободной поверхности полупроводника, образуются поверхностные состояния, создающие, как правило, слой обеднения. Этот слой вызывает дополнительное сужение проводящего канала, в результате чего квантовые эффекты можно наблюдать и в полосках большей ширины – порядка десятой доли микрона.

Можно поступить и иначе. Поверхность полупроводниковой структуры покрывают металлическим электродом, создающим с полупроводником контакт Шоттки^{*)} и имеющим узкую щель (рис. 6.22, б). Если гетерограница находится достаточно близко от поверхности, в слое обеднения, то двумерные электроны на границе будут отсутствовать всюду, кроме узкой области под щелью. Такой тип одномерной структуры обладает дополнительным преимуществом: меняя напряжение на затворе, мы можем управлять эффективной шириной квантовой нити и концентрацией носителей в ней.

^{*)} Барьер (контакт) Шоттки – потенциальный барьер, образующийся в приконтактном слое полупроводника, граничащем с металлом; исследован *W. Schottky* в 1939 г. Для возникновения барьера Шоттки необходимо, чтобы работы выхода электронов из металла и полупроводника были разными. Из-за большой электропроводности металла электрическое поле в него не проникает, и контактная разность потенциалов φ_k создаётся в приповерхностном слое полупроводника. В этом случае приконтактная область полупроводника будет обеднена (или обогашена) электронами. В результате в приконтактной области полупроводника зоны изгибаются вверх (или вниз), создавая потенциальный барьер.

Резонансный туннельный диод. Квантовая механика предсказывает особое поведение частиц, налетающих на потенциальные барьеры. Даже если полная энергия меньше потенциальной, есть вероятность преодолеть барьер — «туннельный эффект» (см. п. 3.7.2). Он используется в резонансном туннельном диоде.

Энергетическая схема этого прибора показана на рис. 6.23. Диод состоит из двух барьеров, разделённых областью с малой потенциальной энергией. Область между барьерами — потенциальная яма, в которой есть один или несколько дискретных уровней. Характерная ширина барьеров и расстояние между ними составляют несколько нанометров. Области слева и справа от двойного барьера играют роль резервуаров электронов проводимости, к которым примыкают контакты. Электроны занимают здесь узкий энергетический интервал. Туннельная прозрачность двойного барьера имеет ярко выраженный резонансный характер.

Предположим, что прозрачность каждого барьера мала. Но это, однако, не означает, что одновременно будет мала и вероятность туннелирования через двойной барьер. Оказывается, что когда энергия электронов, налетающих на барьеры, равна энергии дискретного уровня, туннельная прозрачность резко возрастает: электрон, проникший в область между барьерами, надолго задерживается там, в результате многократного отражения от левого и правого барьеров существенно возрастает вероятность туннелирования. Можно сказать, что при резонансе из-за интерференции волн во внутренней области гасится волна, отражающаяся от двойного барьера. Волна, упавшая слева, полностью проходит направо.

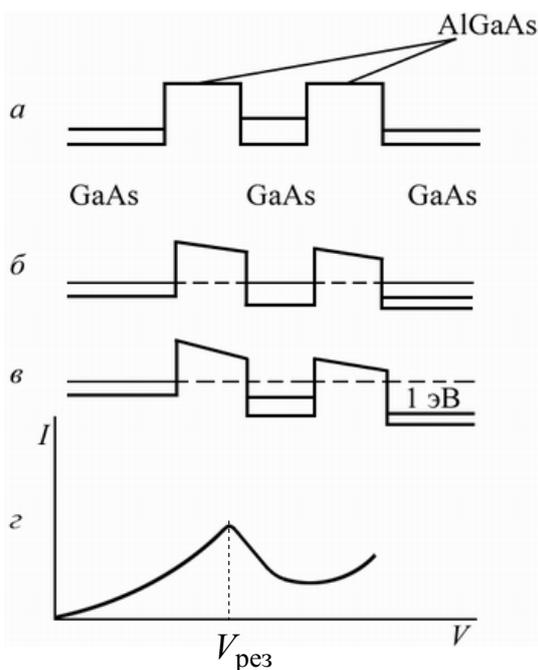


Рис. 6.23. Схема работы и вольт-амперная характеристика резонансного туннельного диода: а — разность потенциалов равна нулю; б — на прибор подано резонансное напряжение $V_{рез}$, при котором ток максимальный; в — напряжение больше резонансного; г — вольт-амперная характеристика

Работа резонансного диода. Ток, протекающий через двойной барьер, зависит от величины приложенного напряжения. Потенциал падает главным образом в области двойного барьера, так как области слева и справа от него обладают высокой проводимостью. Если приложенное напряжение мало и энергия электронов, налетающих на барьер слева, меньше энергии дискретного уровня, то прозрачность барьера и протекающий ток будут малы. Ток достигает максимального значения при напряжениях, когда энергия электронов равна энергии дискретного уровня (рис. 6.23, б). При более высоких напряжениях энергия налетающих электронов станет больше энергии дискретного уровня и туннельная прозрачность барьера уменьшится (рис. 6.23, в). Ток также уменьшится. Вольт-амперная характеристика резонансного туннельного диода показана на рис. 6.23, г. На ней имеется максимум (если в области между барьерами не один, а несколько дискретных уровней, то и максимумов будет несколько).

Справа от максимума кривая $I(V)$ имеет падающий участок, где ток убывает с ростом напряжения. Можно еще сказать, что на вольт-амперной характеристике имеется участок отрицательного дифференциального сопротивления. Благодаря этому в электронных схемах резонансный диод может использоваться не только как выпрямитель, но и выполнять самые разнообразные функции. Если к центральной области резонансного диода подвести контакт, через который можно управлять положением дискретного уровня, получится новый прибор — транзистор. Из таких транзисторов, по-видимому, и будут строиться интегральные схемы новых поколений.

Резонансный туннельный диод — это первое реальное устройство с квантовой ямой и барьерами. Он был создан Лео Эсаки и Чангом в 1974 г., хотя идея прибора была предложена раньше Л. Иогансеном в 1963 г.

6.8. Лазеры на квантовых ямах

Наиболее успешно квантовые структуры используются для создания лазеров. Уже сегодня эффективные лазерные устройства на квантовых ямах дошли до рынка и применяются в волоконно-оптических линиях связи. Для работы любого лазера необходимо создать инверсную населённость энергетических уровней.

Кроме того, каждому лазеру для повышения когерентности и направленности излучения необходим оптический резонатор или система зеркал, которая «запирает» электромагнитное излучение в рабочем объёме.

Для того чтобы квантовую яму превратить в лазер, нужно её подсоединить к двум контактам, через которые электроны могут непрерывно поступать в рабочую область. Пусть через один контакт (рис. 6.24) электроны поступают (например, слева) в зону проводимости и создают инверсную населённость энергетического уровня E_{c1} относительно E_{v1} . Далее, переходя спонтанно или стимулированно с уровня E_{c1} на уровень E_{v1} , они будут излучать кванты света. Затем через валентную зону носители тока должны уходить на другой (правый) контакт.

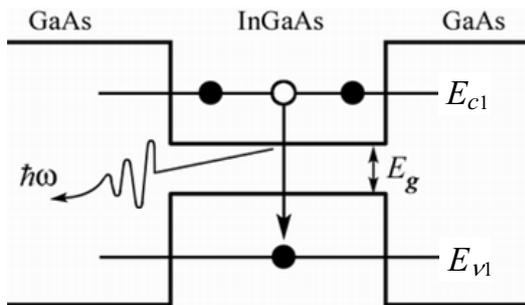


Рис. 6.24. Энергетическая схема лазера на квантовой яме. Электрон излучательно перешёл с уровня E_{c1} на уровень E_{v1}

Частота оптического излучения ω определяется условием

$$\hbar\omega = E_g + E_{c1} + E_{v1},$$

где E_{c1} и E_{v1} — энергии первых квантовых энергетических уровней, соответственно, в зоне проводимости и валентной зоне; E_g — ширина запрещённой зоны.

Электромагнитное излучение, генерируемое лазером, нужно сконцентрировать в центральной, рабочей области прибора. Для этого показатель преломления внутренних слоёв должен быть больше, чем внешних, чтобы в результате полного внутреннего отражения фотоны не могли покинуть активную область через боковые поверхности. При этом внутренняя область играет роль волновода. На границах этого волновода нанесены зеркала, которые образуют резонатор.

Лазеры на квантовых ямах обладают преимуществами по сравнению с обычными полупроводниковыми лазерами. Эти приборы можно перестраивать, управляя параметрами энергетического спектра. Так, при уменьшении размеров ямы минимальные энергии электронов E_{c1} в зоне проводимости и E_{v1} в валентной зоне увеличиваются и частота, генерируемая лазером, возрастает. Подбирая толщину квантовой ямы, можно добиться, чтобы затухание волны в оптической линии связи, в которую поступает излучение, было минимальным. В двумерном электронном газе легче создать инверсную населённость. Поэтому лазеры на квантовых структурах очень экономны, они питаются меньшим током, нежели другие полупроводниковые лазеры, и дают больше света

на единицу потребляемой энергии – до 60 % электрической мощности преобразуется в свет. В последнее время во многих лабораториях мира ведутся работы по созданию лазеров на квантовых точках.

В 2000 году лауреатами Нобелевской премии в области физики стали российский физик-академик Жорес Алферов и американец Герберт Кремер за открытие гетероструктур и разработку на их основе систем опто- и высокоскоростной электроники.

В отличие от стандартных лазеров других типов, в полупроводниковом лазере используются излучательные квантовые переходы не между изолированными уровнями энергии атомов, молекул и ионов, а между разрешёнными энергетическими зонами кристалла. Таким образом, в них возбуждаются и излучаются атомы, слагающие кристаллическую решётку, что определяет важную особенность полупроводниковых лазеров – малые размеры и компактность (размеры кристалла имеют порядок $\sim 10^{-9}$ м). Однако последние могут принадлежать к более прогрессивным разновидностям, в частности к инжекционным лазерам на гетеропереходе.

Инжекционные лазеры на гетеропереходе представляют двусторонние гетероструктуры (рис. 6.25), в которых активный слой (GaAs) заключен между двумя полупроводниковыми гетеропереходами. Один из них (типа $p-n$) служит для инъекции электронов, а второй (типа $p-p$) отражает инжектированные электроны, препятствуя их диффузионному растеканию из активного слоя (электронное ограничение). При одинаковом токе накачки в активном слое гетероструктуры достигается большая концентрация электронно-дырочных пар и, следовательно, большее оптическое усиление, чем в классических полупроводниковых лазерах на $p-n$ -переходах.

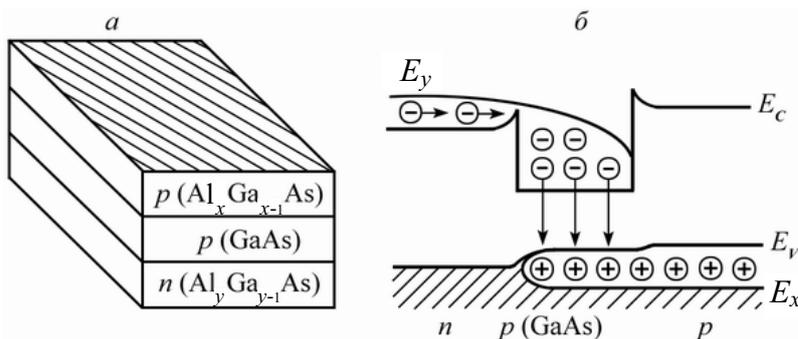


Рис. 6.25. Инжекционные лазеры на гетеропереходе

Другое преимущество гетероструктуры в том, что образованный активным слоем диэлектрический волновод удерживает излучение, распространяющееся вдоль структуры, в пределах активного слоя (оптическое ограничение), благодаря чему оптическое усиление использу-

ется максимально эффективно. У полупроводниковых лазеров на гетеропереходе – гетеролазеров, необходимая плотность тока при температуре 300 К более чем в 10 раз ниже обычных полупроводниковых лазеров на p - n -переходе, что позволяет осуществить непрерывный режим генерации при температуре до 350 К.

6.9. Электронная эмиссия

Если к металлу (окислу или полупроводнику) приложить электрическое поле, которое стремится вырвать электроны из металла, то появляется устойчивый ток электронов, покидающих металл. Потенциальная энергия, обусловленная постоянным электрическим полем \mathcal{E} , равна $U = -e\mathcal{E}x$. На рис. 6.26, *a* приведён результирующий потенциал, в котором движется электрон проводимости при «слабых» и «сильных» электрических полях.

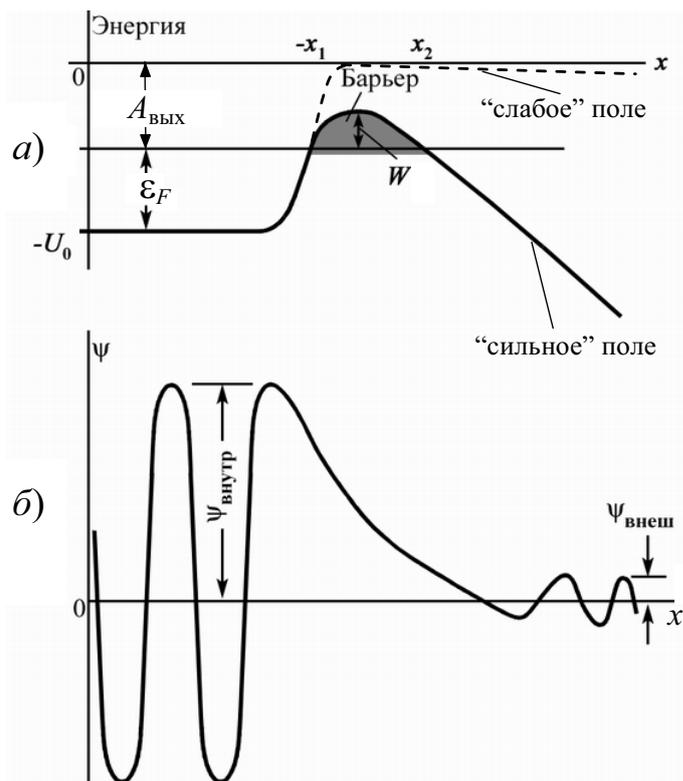


Рис. 6.26. Диаграмма потенциальной энергии электрона при наличии «сильного» (сплошная линия) и «слабого» (пунктирная линия) внешнего электрического поля (*a*); *b* – качественный вид волновой функции электрона, находящегося внутри ямы на уровне Ферми ϵ_F в случае «сильного» поля

При «слабых» электрических полях ($\mathcal{E} \sim 10^3 - 10^5$ В/м) высота барьера практически равна работе выхода $A_{\text{вых}}$ электрона из металла (рис. 6.26, *a*, штриховая линия). В этом случае незначительная часть электронов, энергия которых больше работы выхода, способны преодолеть потенциальный барьер $A_{\text{вых}}$ и выйти из металла в вакуум. Явле-

ние испускания электронов нагретыми телами (эмиттерами) в вакуум называется термоэлектронной эмиссией. Плотность тока насыщения термоэлектронной эмиссии равна:

$$j = BT^2 \exp(-A_{\text{вых}}/kT) \text{ — формула Ричардсона–Дэшмана.}$$

Здесь постоянная $B = 4\pi mek^2/\hbar^3 = 120 \text{ А}/(\text{см}^2 \cdot \text{К}^2)^*$. Согласно формуле Ричардсона–Дэшмана при $T \rightarrow 0$ плотность термоэмиссионного тока $j \rightarrow 0$.

Однако, при больших напряженностях вытягивающего поля ($\mathcal{E} \sim 10^7\text{--}10^9 \text{ В/м}$) высота потенциального барьера заметно понижается до величины $W < A_{\text{вых}}$, при одновременном уменьшении его ширины (рис. 6.26, а, сплошная линия). В этом случае даже если катод охладить до абсолютного нуля, то в «сильных» электрических полях электроны всё равно будут испускаться. Это новое явление обусловлено квантовым процессом — туннельным эффектом (см. п. 3.7.2).

6.9.1. Автоэлектронная эмиссия

Электронный ток продолжает течь с катода даже при очень низких температурах, когда отсутствуют электроны с тепловыми энергиями, достигающими W . Это явление называется автоэлектронной эмиссией** и представляет собой важное следствие квантовой механики. В запрещенную с точки зрения классической физики область волновая функция проникает, уменьшаясь по мере распространения по экспоненциальному закону. В рассматриваемом случае мы имеем дело с потенциальным барьером высотой W и шириной $(x_2 - x_1)$ (рис. 6.26). При этом высота и ширина барьера уменьшаются с увеличением напряженности внешнего вытягивающего электрического поля вблизи поверхности металла.

*) Формула Ричардсона–Дэшмана применима и для описания термоэмиссии полупроводников. В этом случае уровень Ферми «закрепляется» на поверхности полупроводников ввиду большой плотности поверхностных электронных состояний, и поэтому работа выхода $A_{\text{вых}}$ слабо зависит от объёмных свойств полупроводника (от степени легирования). Характер термоэлектронной эмиссии полупроводников становится схожим с термоэмиссией металлов.

**) Автоэлектронная эмиссия (полевая эмиссия, электростатическая эмиссия, туннельная эмиссия) — испускание электронов проводящими твёрдыми и жидкими телами под действием внешнего электрического поля \mathcal{E} достаточно высокой напряжённости ($\mathcal{E} \sim 10^8\text{--}10^9 \text{ В/м}$) у их поверхности. Автоэлектронная эмиссия обнаружена Р.У. Вудом в 1897 г.

Согласно классической физике электрон, полная энергия которого равна ε_f внутри металла, в точке x_1 должен иметь нулевую кинетическую энергию. Благодаря тому, что со стороны атомов металла на электрон действуют силы притяжения, он возвратится из этой точки обратно на прежнее место. Классическая физика запрещает электронам проникать даже на небольшие расстояния внутрь барьера. В области между точками x_1 и x_2 кинетическая энергия электронов оказалась бы отрицательной, что недопустимо с точки зрения классической физики.

Из уравнения Шрёдингера следует, что электронная волна существует и в этой области. Из рис. 6.26, б следует, что она должна изгибаться в направлении к оси x . Заметим, что с некоторой вероятностью электрон можно обнаружить и вне металла. Согласно квантовой механике вероятность проникновения сквозь барьер при каждом столкновении с ним данного электрона должна составлять $\varphi_{\text{внеш}}^2/\varphi_{\text{внутр}}^2$ (подробно этот вопрос рассмотрен в п. 3.7.2). Классическим примером потенциального барьера мог бы служить маленький стеклянный шарик, катающийся внутри чаши. Если шарик выпустить у края чаши, то он будет двигаться только внутри чаши, но никогда не выберется из нее.

Однако, согласно представлениям квантовой механики, имеется, хотя и очень небольшая, вероятность (порядка одного шанса на $10^{(1029)}$) того, что шарик исчезнет из чаши.

Оценим величину тока холодной эмиссии электронов из металла. Чтобы вырвать электрон из металла, ему нужно сообщить дополнительную энергию, равную работе выхода $A_{\text{вых}}$. Это означает, что электрон в металле находится в потенциальной яме, глубина которой $U_0 = A_{\text{вых}}$ (рис. 6.27, а).

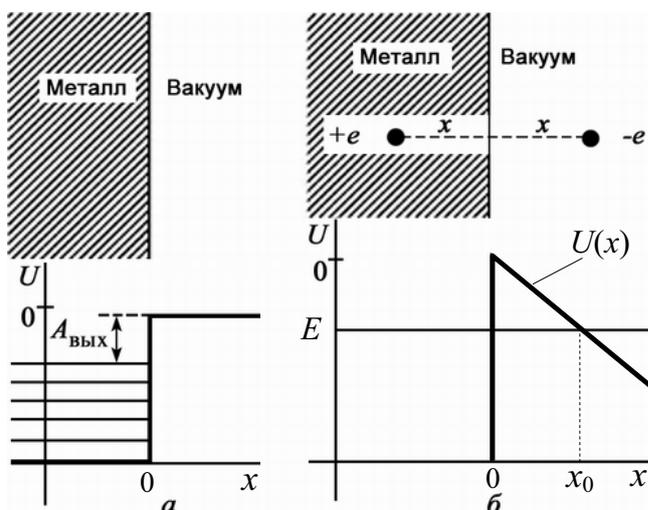


Рис. 6.27. Туннельный механизм холодной эмиссии электронов из металла: внешнее электрическое поле отсутствует или мало (а); б — приложено «сильное» электрическое поле

Вблизи поверхности металла имеется электрическое поле напряженности \mathcal{E} , способствующее выходу электронов из металла. Для простоты изложения примем, что работа выхода $A_{\text{вых}}$ не зависит от напряженности поля \mathcal{E} вблизи поверхности. Тогда вблизи поверхности металла потенциальная энергия электрона имеет вид

$$U(x) = U_0 - e\mathcal{E}x = A_{\text{вых}} - e\mathcal{E}x,$$

то есть на границе металл–вакуум возникает потенциальный барьер треугольной формы (рис. 6.27, б). Туннелирование электронов через этот барьер и объясняет явление «холодной» или, как её чаще называют, автоэлектронной эмиссии – выход электронов из металла при сколь угодно низких температурах.

В рамках классической физики явление холодной эмиссии не находит объяснения. Поскольку электрическое поле в металл не проникает, то оно может изменить потенциальную энергию электронов лишь вне металла. Это приводит к возникновению потенциального барьера, преодолеть который (согласно представлениям классической физики) электрон не может.

В квантово-механическом рассмотрении (см. п. 3.7.2) вероятность туннелирования электрона из металла определяется коэффициентом прохождения D сквозь треугольный потенциальный барьер (рис. 6.27, б):

$$D \approx \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx \right\},$$

т. е. задача сводится к вычислению интеграла

$$I = \frac{2}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{2m[U(x) - E]} dx,$$

где $U(x) = A_{\text{вых}} - e\mathcal{E}x$, а верхний предел интегрирования x_0 находится из условия $U(x_0) = E$ (рис. 6.27, б). Интегрируя, получаем

$$I = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar\mathcal{E}} (A_{\text{вых}} - E)^{3/2}.$$

Введём обозначение

$$\mathcal{E}_0 = \frac{4\sqrt{2m}}{3e\hbar} (A_{\text{вых}} - E)^{3/2},$$

где величина \mathcal{E}_0 имеет смысл эффективного электрического поля в металле. Коэффициент прохождения электронов сквозь барьер

$$D \approx \exp \left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}} \right).$$

Плотность тока холодной эмиссии j пропорциональна коэффициенту прохождения D электронов сквозь барьер. Следовательно, плотность тока как функции напряжённости электрического поля \mathcal{E} имеет вид

$$j = j_0 \exp\left(-\frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right).$$

Оценим величину \mathcal{E}_0 . Полагая $A_{\text{вых}}\mathcal{E} \sim 1$ эВ, получаем $\mathcal{E}_0 \sim 10^8$ В/м.

Заметный по величине ток холодной эмиссии может достигаться лишь при приложении к металлу электрического поля, напряженность которого $\mathcal{E} \sim \mathcal{E}_0 \sim 10^8$ В/м.

Холодная эмиссия электронов находит широкое применение при изучении физических свойств поверхностей, адсорбции газов, явлений катализа и коррозии. Эмиттеры с холодной эмиссией (автоэлектронные эмиттеры) используются в технике, особенно в тех случаях, когда необходимо получить высокую плотность тока j . Для того чтобы создать большую напряженность электрического поля \mathcal{E} вблизи поверхности металла, автоэлектронные эмиттеры делают в виде поверхностей с малым радиусом кривизны: в виде острия, лезвия, торца нити и т. д.

На рис. 6.28 приведена электронная микрофотография эмиттера с многоострийной поверхностью, полученного отечественными учеными из Объединенного института ядерных исследований (г. Дубна) с помощью современных трековых методик. Плотность острия эмиттера составляет $\sim 10^7$ см⁻². По форме острия представляют собой конусы высотой 6,6 мкм и диаметром основания 1,5 мкм. Средний радиус кривизны вершины конусов составляет 0,1 мкм, угол раствора конуса — 12°.

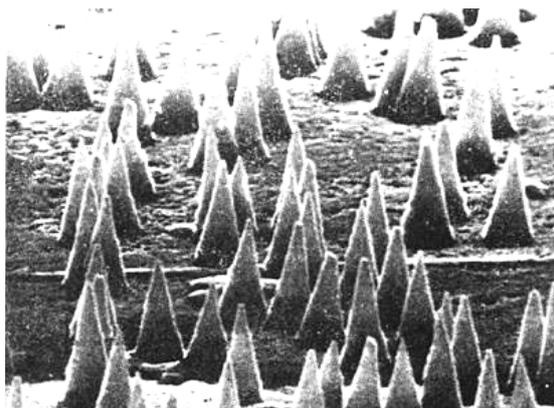


Рис. 6.28. Микрофотография эмиттера с многоострийной поверхностью

Достоинством эмиттеров с холодной эмиссией является то, что они не требуют энергетических затрат на подогрев, а также их безынерционность. Холодная эмиссия может играть и негативную роль, способствуя утечкам тока и развитию вакуумного пробоя. Для снижения влияния холодной эмиссии в таких ситуациях необходимо уменьшить

поле \mathcal{E} у поверхности проводника или повысить работу выхода $A_{\text{вых}}$, подбирая соответствующие материалы или покрытия.

На самом деле пример проникновения сквозь потенциальный барьер можно найти и в классической физике. Поскольку уравнение Шрёдингера и уравнения для световых волн или волн в жидкости имеют один и тот же вид, можно ожидать, что проникновение через барьер вполне возможно в оптике. Поверхность стеклянной пластины представляет собой барьер для света, пытающегося выйти из неё наружу.

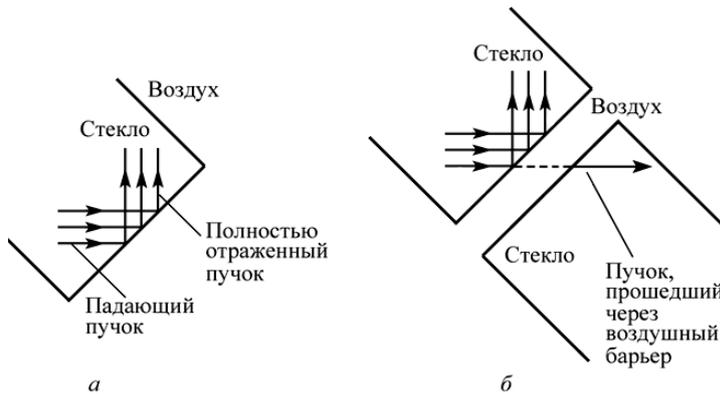


Рис. 6.29. Проникновение света через барьер. При помещении второй стеклянной пластинки рядом с первой часть света может проникнуть из первой пластинки во вторую

Если свет падёт на поверхность под углом больше критического (такие углы запрещены законом Снеллиуса), то он не может пройти сквозь барьер и, следовательно, полностью отразится обратно в стекло (рис. 6.29, а). Однако если вблизи этой пластинки поместить другой кусок стекла (на расстоянии одной или двух длин волн, как показано на рис. 6.29, б), то часть света преодолет барьер и станет распространяться во второй стеклянной пластинке.

6.10. Лазерная запись информации

Качественный скачок в создании компактных быстродействующих систем постоянной памяти, звуко- и видеозаписи, обусловленный переходом на цифровое кодирование и на бесконтактные процессы запись—воспроизведение, и в области передачи изображения на расстояния был сделан на основе использования лазерных систем записи, возможности которых исключительно велики и разнообразны. Они могут быть применены для цифровой, растровой, а также аналоговой записи изображений и текстов.

6.10.1. Цифровая запись информации

Вся информация в компьютере представляется в цифровом двоичном коде. Каждому символу соответствует свой индивидуальный набор единиц — персональный код. По этим кодам компьютер и распознает символ, когда читает его из файла или получает с клавиатуры.

Как и на носителях любого другого типа, информация на оптических лазерных компакт-дисках (*Compact Disk* — CD) хранится также в двоичной форме, записанной в виде набора 1 и 0.

Эта единица хранения информации называется битом (*bit*).

Восемь битов составляют еще одну единицу — байт (*byte*).

Поскольку компьютер при работе имеет дело только с двумя состояниями (1 и 0), то удобно использовать сортировку по двойкам, точнее, по степеням двойки, где, например, восемь — это два в кубе. Принято, что

- 1 байт = 8 бит = 2^3 бит;
- 1 Кбайт = 1024 байт = 2^{10} байт;
- 1 Мбайт = 1024 Кбайт = 2^{10} Кбайт = 1048576 байт = 2^{20} байт.

Цифровой способ записи данных применяется не только в компьютерной технике. Эта форма записи очень устойчива к различного рода помехам. При считывании цифровой записи амплитуда сигнала, в отличие от аналоговой формы, не важна. Важно лишь наличие или отсутствие сигнала. Поэтому в настоящее время этот способ хранения информации используется в очень многих отраслях науки и техники. Самым доступным примером этому являются аудио- и видеодиски.

6.10.2. Принцип записи и хранения информации на CD

В отличие от магнитных носителей (FD и HD), где 1 и 0 отличаются наличием или отсутствием намагниченности магнитного слоя накопителя, на лазерных дисках каждый бит записан в виде наличия или отсутствия отражения лазерного луча от поверхностного оптического диска.

Различают два основных технологических процесса изготовления компакт-дисков: для индивидуальной записи и для выпуска серии одинаковых дисков.

К настоящему времени разработано много оптических дисковых систем записи цифровой информации, которые, в основном, аналогичны, но отличаются средой для записи, применяемым лазером и оптикой. Схема установки представлена на рис. 6.30. Световой пучок лазера 1 оптической системой 2 фокусируется на поверхность вращающе-

гося диска-оригинала 3. Диск изготавливается из оптического поликарбоната толщиной 0,6...1,0 мм, на поверхность которого наносится тонкопленочное металлическое покрытие толщиной 5...50 нм. Он приводится во вращение стабилизированным электроприводом 4 с постоянной угловой или линейной скоростью в пределах 200...800 об/мин. Модулятор 5 предназначен для внесения в световой пучок информации путем изменения интенсивности пучка в соответствии с подаваемым на его вход цифровым потоком. Формируемые оптической системой и модулятором световые импульсы от лазера образуют в пленке отверстия — питы. В процессе записи объектив смещается к центру диска приводом 6, в результате чего на диске образуется спиральная дорожка из питов. Оптимальный шаг дорожки при звукозаписи 1,5...2 мкм при погрешности 0,05...0,1 мкм, поперечный размер питов составляет 0,4...0,6 мкм.

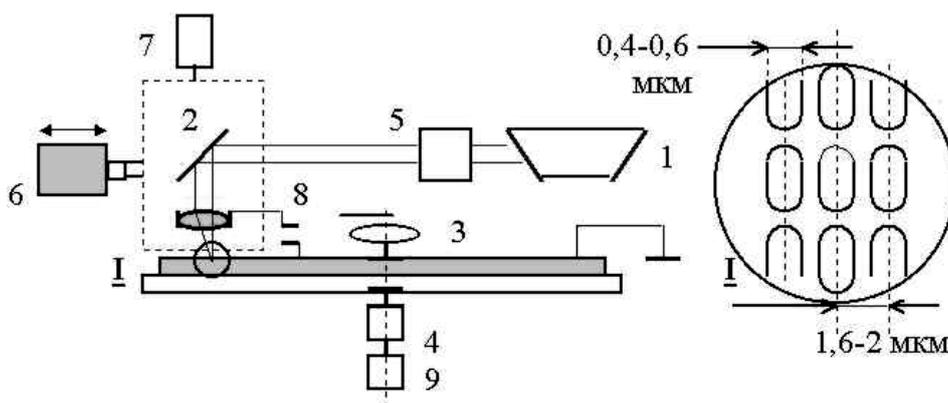


Рис. 6.30. Схема установки цифровой записи информации: 1 — лазер; 2 — оптическая система; 3 — диск-оригинал; 4 — электропривод вращения диска; 5 — модулятор; 6 — электропривод поперечного смещения объектива; 7 — электродинамический двигатель; 8 — ёмкостной датчик ошибок фокусировки; 9 — система стабилизации частоты вращения двигателя 4

При видеозаписи и при записи информации на диски требования к плотности записи еще более жесткие. Такую плотность невозможно обеспечить без применения лазеров. Перемещение линзы осуществляется электродинамическим двигателем 7, обычно используемым в громкоговорителях для возбуждения колебаний диффузора (рис. 6.36).

Преимуществом цифровой лазерной записи на металлических пленках является возможность контроля ее качества одновременно с записью. Для этого в систему записи через тот же объектив, но под небольшим углом посылается считывающий лазерный пучок меньшей мощности. Отраженный от дорожки луч используется для оперативного отслеживания качества записи.

Индивидуальная запись делается на пишущем CD-ROM непосредственно на компьютере. В этом случае она ведется на специальные матрицы с тонким (несколько микрометров) слоем напыленного в вакууме металла с высоким коэффициентом отражения в ИК-области спектра. Для этого чаще всего используется золото (Au). Металлический отражательный слой наносится на непрозрачное пластиковое термопластичное основание и сверху покрывается слоем прозрачной пластмассы, призванной защищать его от внешних воздействий.

Перед началом записи в записывающем устройстве матрица немного подогревается. В процессе записи в месте фокусировки луча ИК-лазера в нагретом термопласте подстилающего слоя происходит фотохимическая реакция, в результате которой происходит структурная перестройка поверхностного слоя – ранее гладкая поверхность становится матовой. Поскольку на подстилающий слой предварительно нанесен отражающий металлический слой, то в данном месте он также становится матовым (диффузно отражающим).

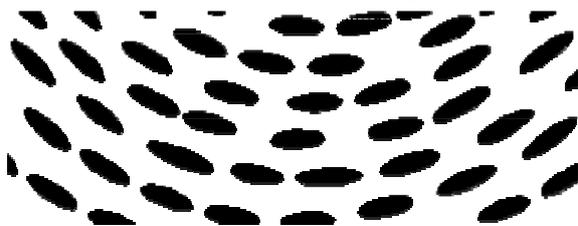


Рис. 6.31. Поверхность компакт-диска при большом увеличении (чёрным цветом показаны участки с нарушенным зеркально отражающим слоем)

Из-за потери зеркальности луч лазера, попадающий на этот участок поверхности при считывании, рассеивается, а в приемный фотодатчик попадает света значительно меньше, чем от неповрежденного зеркального участка (рис. 6.31).

Пришедший от зеркального участка сигнал отражающего слоя интерпретируется как 1, а от матового – как 0. Эти участки диска (матовый и зеркальный) получили название пиксели. На каждом из таких пикселей записывается 1 бит информации.

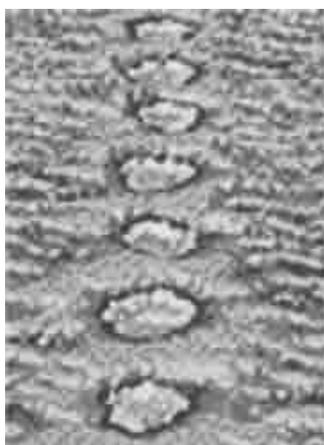


Рис. 6.32. Так выглядит в сканирующий электронный микроскоп последовательность питов, «записанная» лазером на поверхности диска CD-R

И при записи, и при считывании диск вращается с постоянной угловой скоростью. Поэтому пиксели должны были бы представлять собой очень малые отрезки дуг, длина которых зависит от радиуса. Однако с помощью регулировки длительности лазерного импульса в зависимости от расстояния до оси вращения, длина всех пикселей делается одинаковой (рис. 6.32).

6.10.3. Формирование записывающего лазерного излучения

Мощность излучения записывающего лазера должна быть достаточной, чтобы локально изменить оптические свойства металлического покрытия диска. Замена газовых лазеров полупроводниковыми диодными лазерами позволила создать компактные системы с меньшими размерами и меньшей стоимостью по сравнению с системами на газовых лазерах. Очень важно, что выходная мощность полупроводниковых лазеров легко модулируется входным сигналом, что позволило упростить схему записи, ранее разработанную для газовых лазеров.

Типовая оптическая схема записывающей системы характеризуется тем, что на входе лазера установлен модулятор δ (см. рис. 6.30), управляемый входным сигналом.

6.10.4. Среды для записи

Требованиям постоянной записи наиболее всего удовлетворяют тонкие пленки сублимирующихся или легко плавящихся, или испаряющихся материалов. Простейшим типом такой среды являются тонкие пленки, осажденные в вакууме. Тонкие пленки удовлетворяют многим требованиям по минимизации устройств памяти. Тем не менее, необходимость минимизации размеров записанного бита информации предъявляет дополнительные жесткие требования как к фокусирующей оптике и лазерному излучению, так и к тонкопленочным материалам записывающей среды. Материал должен иметь малую тепло- и температуропроводность, низкую температуру фазового перехода, используемого для записи, в результате которого изменяются оптические свойства бита информации, причем это изменение должно быть достаточным, чтобы обеспечить высокое отношение сигнал—шум при считывании информации.

Кроме того, материал, наряду с такими свойствами, как высокая разрешающая способность (не менее 1000 линий/мм при размере бита 1 мкм) и стойкость к окружающей среде, должен обладать высокой чувствительностью, поскольку мощность существующих лазеров, пригод-

ных для использования в системах записи информации, составляет несколько милливатт. Отсюда вытекают требования к уменьшению пороговой плотности лазерного излучения I_0 для записи.

В структуре CD-R диска можно выделить пять слоев (рис. 6.33).

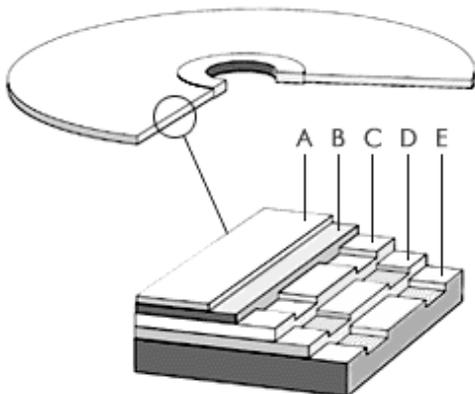


Рис. 6.33. Структура CD-R диска

Изначально изготавливается пластмассовая основа диска (поликарбонат (E)), которая составляет основную его часть и придает CD-R необходимую прочность и форму. На готовую пластмассовую форму наносится активный слой (D). Этот слой позволяет осуществлять запись на диск и определяет его надежность и качество считывания информации в дальнейшем. После нанесения активного слоя диск покрывается специальным светоотражающим материалом (C). Завершающим этапом изготовления диска является нанесение защитного слоя (B), на который наносится изображение (A). Основное отличие всех CD-R в слое (D). На сегодняшний день существуют две разновидности красителей для этого слоя: на основе цианина и на основе фталоцианина. Цианиновый краситель обладает сине-зеленым (большинство дисков TDK) или насыщенно синим (Verbatim, серия «Metal Azo») оттенком рабочей поверхности. Фталоцианин практически бесцветен, с бледным оттенком салатного (диски Rostok Media) или золотистого цвета (печально известные ВТС).

Сложно сказать, какой из этих двух слоев лучше. Цианиновый краситель более терпим к различным сочетаниям мощности чтения / записи, чем «золотой» фталоцианиновый, но менее устойчив к свету. Фталоцианин – более современная разработка. Диски на основе этого активного слоя менее чувствительны к солнечному свету и ультрафиолетовому излучению, что способствует увеличению долговечности записанной информации и более надежному хранению в неблагоприятных условиях. Поэтому при записи аудиодисков стоит обратить внимание на качественные цианиновые CD-R. Музыкальные центры более устойчивы в работе с цианиновыми CD-R дисками, нежели с дисками

на основе фталоцианина. Для записи архивных данных, требующих длительного хранения, следует отдавать предпочтение качественным фталоцианиновым дискам.

6.10.5. Плотность записи

Структуру оптического диска, который предназначен для записи и хранения информации в цифровом виде, можно представить как плоскую отражательную дифракционную решётку, состоящую из концентрических штрихов, образованных цепочками пикселей. Чтобы считать записанную на компакт-диске информацию, необходимо сфокусировать лазерный луч в пятно, соизмеримое с размерами пикселя. Если использовать пучок диаметром в несколько десятков или сотен пикселей, то можно получить интегральную по сечению пучка информацию о размерах самих пикселей.

Существующая на компакт-диске дифракционная решётка, имея малый период d , обладает достаточно высокой дифракционной эффективностью (поэтому визуально хорошо видна интерференционная картина на поверхности диска в отраженном свете). По определению, d — это расстояние между центрами штрихов дифракционной решетки или суммарная ширина пикселя и промежутка между дорожками из пикселей. То есть ширина каждого пикселя может быть принята равной $d/2$. Если же считать, что длина l пикселя равна его ширине, то на площади

$$S_{bit} = d(d/2) = 0,5 \cdot d^2$$

будет записан 1 бит информации.

Таким образом, величина

$$W = 1/S_{bit} = 2/d^2$$

представляет собой плотность записи информации или просто плотность информации. Для удобства использования параметр плотности информации W рассчитывается как количество битов на 1 мм^2 , т. е. $[W] = \text{бит}/\text{мм}^2$. Отсюда следует, что, зная общую площадь S_{data} , занятую информацией на диске, по формуле —

$$K_{data} = S_{data} W$$

— можно определить информационную емкость K_{data} оптического диска в битах.

Если освещающий свет проходит от объекта к линзе, то он попадет в линзу, только если находится в пределах удвоенного угла θ , называемого угловой апертурой линзы (рис. 6.34).

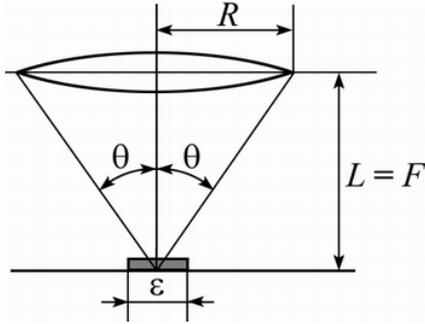


Рис. 6.34. Разрешающая способность линзы $\varepsilon = 0,5\lambda/(n\sin\theta)$ – угловая апертура линзы

В этом случае разрешающая способность линзы ε , т. е. минимальные размеры изображений, которые не сливаются в одну точку, определяется выражением

$$\varepsilon = 0,5\lambda/(n\sin\theta).$$

Здесь n – показатель преломления среды, в которой находится линза; θ – апертурный угол; λ – длина волны в вакууме.

Для когерентного света это означает, что в пределах апертуры должен находиться хотя бы первый порядок дифракции. Если в апертуру линзы попадают и лучи, соответствующие дифракционным максимумам более высоких порядков, то качество получаемого изображения повышается. Но условие попадания первого дифракционного максимума является обязательным. Произведение $A = n\sin\theta$ называется числовой апертурой линзы.

Учитывая, что линза располагается в воздухе ($n = 1$) и на фокусном расстоянии от объекта, для числовой апертуры получаем

$$A = \frac{R}{\sqrt{R^2 + F^2}},$$

где R – радиус линзы, а F – ее фокусное расстояние. Тогда формулу можно записать в виде

$$\varepsilon = \frac{\lambda}{2A}.$$

Эта же формула определяет и минимальный диаметр пятна, в который может быть сфокусирован свет линзой.

Поскольку линейные размеры пикселя на оптическом диске должны быть не меньше разрешающей способности линзы ε , то появляется возможность оценки минимально допустимого размера (радиуса) линзы, способной работать в считывающем устройстве CD-ROM. Соответствующие параметры компакт-дисков для записи информации приведены в таблице.

Параметр диска	CD	DVD-5	DVD-9	DVD-10	DVD-18
Емкость (Гбайт)	0,68	4,7	8,5	9,4	17,0
Диаметр	120 мм	120 мм			
Толщина	1,2 мм	1,2 мм (0,6 мм + 0,6 мм)			
Длина волны лазера	780 нм (ИК)	650 / 635 нм (красный)			
Апертура линзы	0,45	0,60			
Ширина трека	1,6 мкм	0,74 мкм			
Минимальный размер «дырки»	0,83 мкм	0,4 мкм			
Ориентировочная скорость	1,2 м/с CLV	4,0 м/с CLV			

6.10.6. Устройство считывающей головки CD-привода

Считывание информации с CD производится с помощью специальной головки, устройство которой схематично показано на рис. 6.35 и 6.36.

И фокусировка лазерного излучения, и соби́рание отраженного от поверхности CD света осуществляются одной линзой. Часть излучения ИК-лазера светоделительным кубиком направляется на линзу и фокусируется на отражающую поверхность оптического диска.

Если лазерный луч попадает на неповрежденный участок зеркального покрытия, то отраженное от него излучение собирается той же самой линзой и, пройдя светоделитель, попадает на фотоприемник, который регистрирует наличие сигнала, — это 1. Если покрытие не отражает — фотоприемник ничего не регистрирует, т. е. отсутствие сигнала эквивалентно 0.

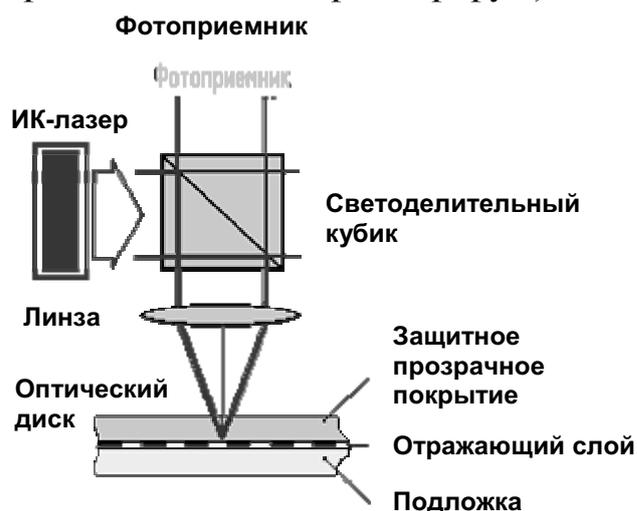


Рис. 6.35. Устройство считывающей головки CD-ROM

Конечно, на светоделителе половина интенсивности лазера и отраженного сигнала теряется, но другие преимущества (компактность, надежность и низкая себестоимость) данной схемы компенсируют этот недостаток.

По сравнению с магнитными носителями, способ хранения информации на оптических дисках отличается повышенной помехоустойчивостью и надежностью. Защищающий отражательную поверхность слой прозрачной пластмассы может быть и поцарапан, и запылен, и облит чем-либо. Однако это приведет лишь к тому, что от лазера до отражающего слоя (и обратно до фотоприемника) дойдет только несколько меньше света, поскольку луч лазера фокусируется строго на отражающую поверхность, проходя слой защитной пластмассы в расфокусированном виде. В результате на дефектах защитного слоя происходит только рассеяние части лазерного пучка. Поскольку интенсивность излучения лазерного диода и чувствительность фотоприемника взяты с большим запасом, то на возможности считывания информации это практически не скажется.

Наиболее опасными (с точки зрения последствий и возможности восстановления) являются царапины, ориентированные по дуге окружности диска или по хорде (особенно во внешней от центра области). Поскольку запись идет по окружности, такие царапины перекрывают большую часть записанной подряд информации. Радиальные царапины гораздо менее опасны.

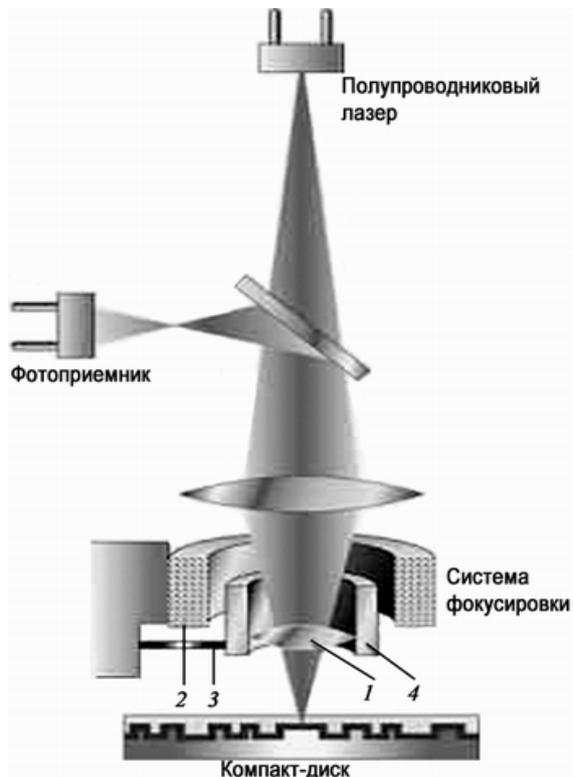


Рис. 6.36. Схема считывания данных с компакт-диска. Система фокусировки включает подвижную линзу (1), приводимую в движение электромагнитной системой, сделанной по аналогии с подвижной системой громкоговорителя. Изменение напряженности магнитного поля, создаваемого катушкой (2), вызывает перемещение подвешенного на упругом держателе (3) магнита (4), к которому крепится линза, и, соответственно, перефокусировку лазерного луча. Благодаря малой инерционности, такая система эффективно отслеживает вертикальные биения диска даже при значительных скоростях вращения

Аудио- и видеодиски реагируют на присутствие повреждений гораздо слабее компьютерных. Это происходит потому, что потеря одного—двух (и даже нескольких подряд) битов практически не сказывается на воспроизведении звука и изображения. Компьютерные диски с этой точки зрения более чувствительны к погрешностям записи.

Специальными алгоритмами кодирования можно добиться снижения чувствительности к потере нескольких битов.

6.10.7. Однослойные DVD

DVD – эта аббревиатура стандарта Digital Versatile Disc (цифровой многофункциональный диск). DVD во многом подобен CD, но значительно отличается от него плотностью записи. На рис. 6.37 показаны различия размеров и плотности расположения пиков «дырок» рабочего слоя у DVD и CD-дисков.

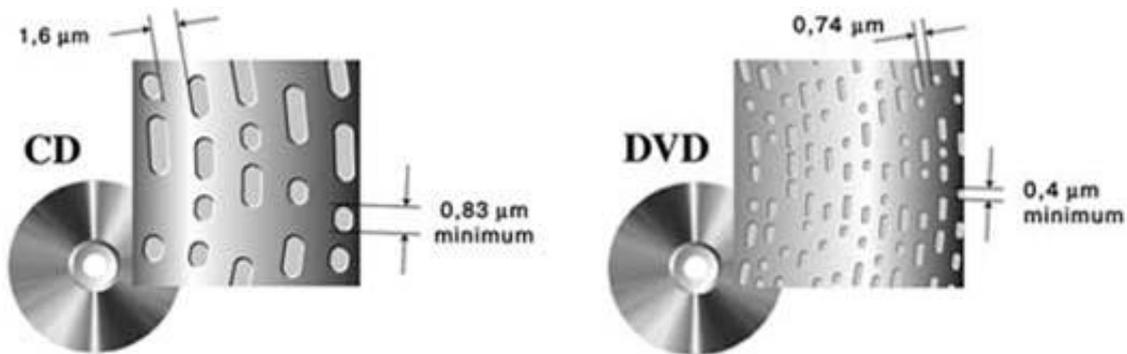


Рис. 6.37. Размер информационных ячеек – пиков – и расстояние между соседними дорожками на дисках DVD (справа) почти в два раза меньше, чем на компакт-дисках (слева). Поэтому на DVD-диске помещается гораздо больше информации

Обычные дисководы CD-ROM используют источник лазерного излучения с длиной волны 780 нм, излучающий невидимый инфракрасный свет. В DVD-плеерах и в DVD-ROM применен излучающий красный свет лазер с длиной волны 650 (635) нм. Такое уменьшение длины волны позволило считывать более мелкие «дырки» рабочего слоя диска, размещенные в плотно расположенных треках (дорожках записи).

Соответствующее увеличение числовой апертуры A линзы с 0,45 до 0,60 дает возможность фокусировать лазерный луч с гораздо большей точностью. Только за счет повышения плотности записи удалось довести емкость диска до 4,7 Гбайт.

6.10.8. FMD-диски

Новое решение проблемы создания дешевого и вместительного носителя информации – это FMD (Fluorescent Multilayer Disk). Принцип работы близок CD/DVD, только информация записывается в виде ячеек (питов), заполненных флуоресцирующим под действием лазера составом^{*)}. При считывании с устройства лазер освещает вращающийся диск, вызывая флуоресценцию ячеек, несущих биты информации. Специальный объектив фокусирует луч лазера в небольшую «точку», вызывая интенсивную флуоресценцию именно тех ячеек, которые попадают в эту точку. Перемещая объектив, можно легко добиться считывания с любого заданного слоя. При этом материал слоев диска и активного состава подбирается прозрачным для флуоресценции, что позволяет увеличить количество используемых слоев.

FMD-диски могут быть записаны несколькими способами. В случае одноразовой записи питы заполняются определенным составом, при облучении которого светом с определенной длиной волны образуется полимер. Этот полимер обладает флуоресценцией с необходимыми для работы в ячейках свойствами, но перезапись на таком диске невозможна, поскольку полимеризация необратима. Однократно записываемый FMD может быть создан двумя способами (рис. 6.38).

При использовании первого способа лазер нагревает нужные ячейки до температуры, при которой молекулы активного вещества, заполняющего питы, перестают светиться (изначально на чистом диске флуоресценцией обладают все ячейки). Такой способ прост в реализации и нетребователен к лазеру.

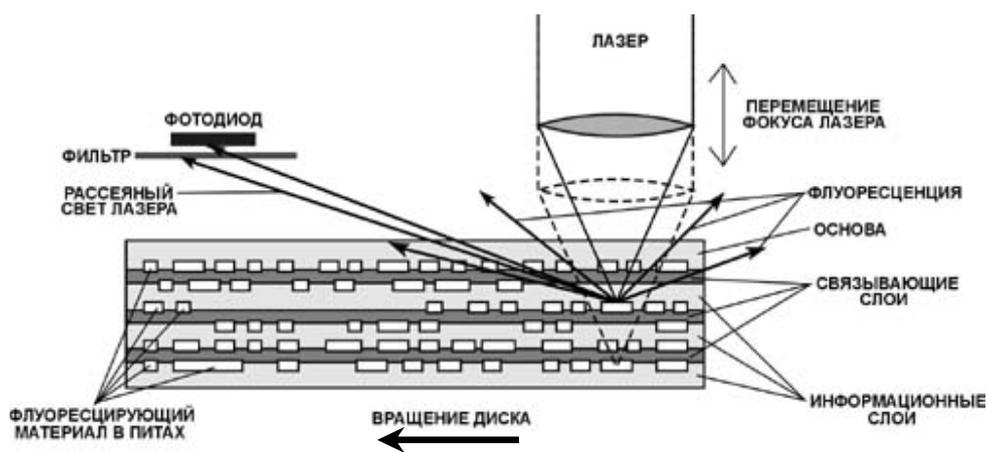


Рис. 6.38. Устройство FMD-диска

^{*)} Флуоресценция – люминесценция, затухающая в течение короткого времени после прекращения возбуждения (обычно время затухания флуоресценции меньше 1 мкс).

Второй способ основан на использовании пороговой фотохимической реакции. Активное вещество при облучении лазером, мощностью, превышающей пороговое значение, претерпевает химическое превращение и становится флуоресцирующим. В этом случае требования к мощности лазера меньше, чем в первом (хотя более жесткие требования к длине волны), так что лазер может заменить LED-матрица (набор светоизлучающих диодов, организованный в массив). Это позволяет поднять скорость записи за счет параллельной записи сразу нескольких ячеек. Многократно перезаписываемых FMD пока не существует, однако уже известны вещества, способные обретать флуоресценцию при облучении светом одной длины волны, и терять ее при облучении светом другой длины волны, или при нагревании, так что создать перезаписываемые FMD возможно.

Новая технология обладает рядом очевидных преимуществ. Уже сейчас прототипы FMD содержат в себе до пятнадцати слоев (слои прозрачны для флуоресценции), а в перспективе — до ста. Это позволит довести объем диска до одного терабайта. Так как флуоресцентный свет не интерферирует, то излучения разных слоев не будут гасить друг друга, а значит, повысится надежность чтения/записи. Также возможно считывание информации с нескольких слоев параллельно (если слои будут флуоресцировать разными цветами). При использовании оптических фильтров и набора фотодиодов можно довести скорость считывания до одного гигабита в секунду.

6.10.9. Способы лазерной записи

Основной процесс записи на тонкопленочных материалах осуществляется их локальным нагреванием лазерным лучом с последующим разрушением и удалением области нагрева. Механизм записи представляет собой плавление со скатыванием жидкой фазы.

Для полупрозрачной пленки, нанесенной на непрозрачную подложку, пороговая плотность лазерного излучения I_0 может быть определена из условия

$$\eta = \frac{\alpha}{\alpha + \tau} = \frac{Q}{I_0 \tau_{\text{и}}} \quad \text{или} \quad I_0 = \frac{Q}{\eta \tau_{\text{и}}},$$

где α и τ — коэффициент поглощения и пропускания пленки (коэффициент отражения принят равным нулю); $Q = (Q_{\text{нагр}} + Q_{\text{пл}})$ — удельное количество теплоты, необходимое для нагревания и плавления пленки (Дж/м²); $\tau_{\text{и}}$ — время, затрачиваемое на создание «дырки» (длительность импульса).

Для пленки толщиной h удельное количество теплоты при температуре подложки T_0 равно

$$Q = \rho h C_V (T_{\text{п}} - T_0) + \rho h L_{\text{п}}.$$

Здесь ρ – плотность материала; C_V – удельная теплоемкость; $T_{\text{п}}$ – температуры плавления; $L_{\text{п}}$ – удельная теплота плавления. Тогда

$$I_0 = \frac{\rho h [C_V (T_{\text{п}} - T_0) + L_{\text{п}}]}{\eta \tau_{\text{и}}} \text{ [Вт/м}^2\text{]}.$$

Наименьшими значениями I_0 будут обладать пленки малой толщины h с малыми значениями температуры плавления $T_{\text{п}}$, низкой удельной теплоемкостью C_V и удельной теплотой плавления $L_{\text{п}}$, но сильным поглощением на длине волны падающего излучения $\eta = \alpha / (\alpha + \tau)$.

Оценим скорость записи на CD-диск при плотности лазерного ИК-излучения $I_0 = 20 \text{ мВт/мкм}^2 = 2 \cdot 10^{10} \text{ Вт/м}^2$. При $\rho = 2 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $h = 2 \cdot 10^{-6} \text{ м}$, $\eta = 0,4$, $C_V = 2 \cdot 10^3 \text{ Дж/(кгК)}$, $L_{\text{п}} = 1 \cdot 10^5 \text{ Дж/кг}$, $(T_{\text{п}} - T_0) = 50 \text{ К}$, получим

$$\frac{1}{\tau_{\text{и}}} = \frac{I_0 \eta}{\rho h [C_V (T_{\text{п}} - T_0) + L_{\text{п}}]} = 1 \cdot 10^7 \text{ бит/с} \approx 1,2 \text{ Мбайт/с}.$$

Дальнейшего уменьшения порога записи можно добиться за счет предварительного подогрева пленки (уменьшение разности $T_{\text{п}} - T_0$) и использования отраженного от зеркальной подложки лазерного луча (повышение значения η). Это достигается следующим образом. На подложку наносится слой хорошо отражающего материала (чаще всего Al), затем прозрачный слой диэлектрика и полупрозрачная пленка поглощающего металла, играющего роль среды для записи. Такая структура позволяет иметь большую энергетическую добавку за счет отражения от пленки Al в процессе локального разрушения (записи) и повысить контраст при считывании от записанных битов информации, по сравнению с матрицей.

Магнитооптическая запись. В современных ЭВМ широкое применение находят магнитные носители для записи, хранения, обработки и считывания информации, которые представляют собой магнитные частицы окислов Fe или Cr в связующей среде. Такие среды имеют много недостатков, обусловленных дискретностью магнитных носителей. Эти проблемы решаются при переходе к непрерывным (пленочным) средам. В тонкопленочных носителях (ТПН) можно реализовать биты меньших размеров и, тем самым, большую плотность записи N . Как правило, в ТПН из-за большой анизотропии формы магнитный момент (ММ) лежит в плоскости образца. При такой конфигурации располо-

жения ММ возникают ограничения на минимальный размер записанных битов.

Однако положение изменится, если создать в ТМН перпендикулярную анизотропию. В этом случае вектор ММ будет расположен по нормали к плоскости пленки, что будет способствовать стабилизации инвертированных (перемагниченных) участков (битов) даже очень малых размеров за счет полей рассеяния. Теоретически достижимая плотность записи информации $N > 10^{10}$ бит/см², практическая же реализация столь высокой плотности лимитируется механическими устройствами записи и считывания информации.

При современном состоянии техники самый минимальный размер бита можно получить лишь при фокусировании лазерного излучения, которое, тем не менее, из-за дифракционного предела не может быть меньше 1 мкм. Тогда реальная плотность записи информации будет составлять $N \sim 10^8$ бит/см².

Направление создания устройств памяти, включающих в себя лазерный термомагнитный принцип записи информации и магнитооптическое считывание также при помощи полупроводниковых миниатюрных лазеров, получило название «магнитооптическая память».

Термомагнитная запись информации. Запись информации на ТМН термомагнитным способом заключается в изменении направления магнитного момента (ММ) локальных участков (битов) в результате одновременного воздействия магнитного поля и лазерного нагрева этих участков. Выбранная величина магнитного поля недостаточна, чтобы перемагнитить основную матрицу, но достаточна, чтобы перебросить ММ в противоположное направление в участках, подверженных локальному лазерному нагреву. Как правило, температура нагрева соответствует температуре Кюри T_c данного магнитного материала пленки. Существуют магнитные материалы, в которых при нагреве сильно уменьшается их коэрцитивная сила H_c . Это явление также используется в технике термомагнитной записи информации, но более эффективно при аналоговой записи.

Для получения эффекта повышения энергетической чувствительности при записи маломощными полупроводниковыми лазерами магнитные материалы должны иметь низкие значения T_c , малый коэффициент теплопроводности χ для уменьшения бокового теплоотвода, высокий коэффициент поглощения α на данной длине излучения λ . Если для простоты предположить малый отвод тепла в подложку, а время выравнивания температуры по толщине h будет намного меньше, чем в

плоскости, то выражение для интенсивности излучения, необходимого для локального нагрева и достаточного для записи, выглядит так:

$$I_0 = (4\pi^2 \cdot h \cdot \chi \cdot \Delta T) / s^2 \text{ [Вт/м}^2\text{]}.$$

Здесь s^2 – площадь пята «дырки»; $\Delta T = T_c - T_0$, где T_0 – температура подложки. При этом считается, что нагрев происходит за время, меньше времени релаксации температуры в плоскости:

$$\tau = (s^2 \rho C_V) / (4\pi^2 \chi).$$

Используем эти выражения и выберем теплофизические параметры, примерно соответствующие металлическим магнитным пленкам Tb–Fe при длительности импульса лазера $\tau_{\text{л}} = 5 \cdot 10^{-9}$ с; величина I_0 составляет $5 \cdot 10^9$ Вт/м² = 5 мВт/мкм². В действительности же из-за стока тепла в сторону подложки реальная величина I_0 примерно на 30 % больше.

Магнитооптическое считывание. В магнитооптической памяти для считывания используются магнитооптические эффекты (эффекты Керра в отраженном свете и Фарадея в проходящем), которые имеют разные знаки в основной матрице и в перемагниченных участках (битах информации). Интенсивность считывающего света должна быть достаточно мала по сравнению с I_0 , чтобы не разрушить информацию. В процессе считывания поляризованный свет проходит через локальный участок пленки, через анализатор и регистрируется в виде сигнала, имеющего тот или иной знак в зависимости от направления ММ.

Полезный сигнал получается как разность интенсивностей пучков, прошедших через противоположно намагниченные участки. Он зависит от магнитооптической добротности материала (удвоенная величина магнитооптического эффекта, поделенная на коэффициент поглощения) и от толщины пленки.

6.11. Современные оптические системы отображения информации

6.11.1. Принцип действия мультимедийных проекторов

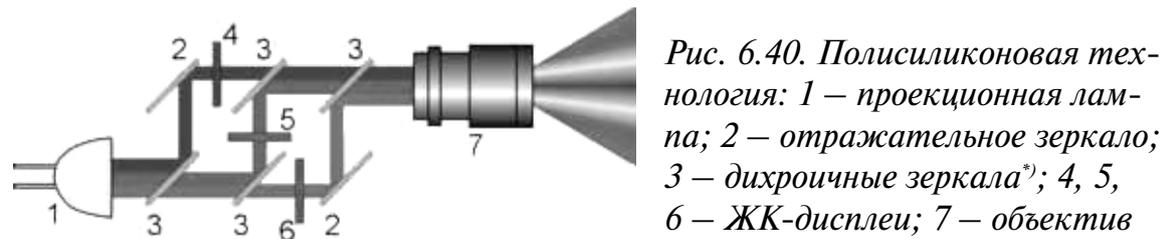
Первые видеопроекторы, предназначенные исключительно для воспроизведения видеосигналов, появились в 70-х гг. XX в. и выполнялись на электронно-лучевых трубках. У них высокая разрешающая способность, обеспечивающая очень хорошее качество изображения. Появление жидкокристаллических дисплеев (ЖКД) привело к принципиально другой конструкции видеопроекторов. В ранних моделях ис-

пользовались многослойные ЖКД, выполненные по тонкопленочной технологии (TFT LCD-panels). Такие дисплеи имеют диагональ от 3 до 26 см (и больше).

Светящиеся точки дисплея (пиксели) под воздействием управляющих сигналов могут излучать любой из базовых цветов (красный, зеленый, синий). Такой однопанельный ЖКД работает на просвет. Схема представлена на рис. 6.39.



Более сложную конструкцию имеют появившиеся позднее проекторы, использующие ЖКД с диагональю 3,3 см (в последнее время – 2,3 см), выполненные на базе полисиликоновой технологии (PSI LCD-panels). В таких проекторах применены 3 дисплея, каждый из которых управляет одним базовым цветом (рис. 6.40).



Полисиликоновая технология обеспечивает очень яркие, насыщенные краски, что особенно важно при проецировании видеоизображений. Кроме того, полисиликоновые матрицы более устойчивы по отношению к длительному тепловому воздействию, чем обычные тонкопленочные. Именно по этим причинам в настоящее время они наиболее часто применяются в проекторах.

Общий недостаток жидкокристаллических проекторов – зернистая структура изображения, которая проявляется тем больше, чем больше проекционное увеличение. А даже незаметная зернистость способна вызвать усталость глаз. Хотя, конечно, относительный размер зерна у видеопроекторов меньше, чем у телевизоров.

*) Дихроизм (от греч. *dichroos* – двухцветный) – различное поглощение веществом света в зависимости от его поляризации (анизотропия поглощения). Поскольку поглощение зависит также и от длины волны, дихроичные вещества оказываются различно окрашенными при наблюдениях в разных направлениях.

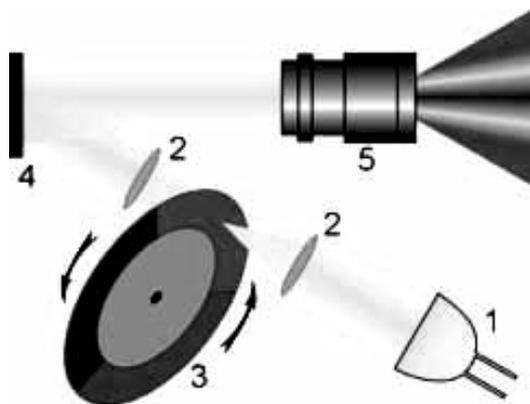


Рис. 6.41. DLP-технология: 1 – проекционная лампа; 2 – конденсорные линзы; 3 – цветовой фильтр; 4 – DMD-микросхема; 5 – объектив

В самое последнее время в проекторах вместо ЖКД стали применять небольшие (1 см^2) интегральные микросхемы. Эти микросхемы, именуемые DMD (Digital Mirror Device), содержат на своей поверхности более миллиона крошечных алюминиевых зеркал размером $1/1000$ человеческого волоса ($16 \times 16 \text{ мкм}^2$). Каждое микрозеркало соответствует одной световой точке на экране, но если пиксели ЖКД работают на пропускание света, то микрозеркала – на отражение (рис. 6.41). За три прохода зеркала отражают лучи трех основных цветов – красный, зеленый и синий. Отличительная черта таких проекторов – равномерное и яркое изображение кинопроекционного качества, не имеющее характерной для жидкокристаллических проекторов строчной структуры. Они дают фотографическое качество изображения, достичь которого для видеосистемы раньше даже не надеялись. Только микрозеркальные проекторы гарантируют отчетливое отображение черной линии, толщиной в один пиксель, без поглощения ее соседними яркими полями.

При отсутствии управляющего сигнала ориентация каждого микрозеркала такова, что отраженный от него свет в объектив не попадает и рассеивается в проекторе. Цветовая гамма создается вращением специального цветового фильтра, если используется один микрозеркальный чип, или за счёт использования трёх таких чипов – по одному на базовый цвет.

Проекторы, использующие микросхемы DMD, на Западе называют DLP-projectors (*Digital Light Processing Projectors*), а в России – микрозеркальными проекторами. Появление микрозеркал и возникшая конкуренция стимулировали значительное усовершенствование конструкции и характеристик проекторов на ЖКД, так что в настоящее время трудно отдать предпочтение тому или иному классу проекторов. Несомненное преимущество микрозеркальная технология имеет только при создании стационарных сверхярких проекторов, прежде всего, за счет высокой теплоустойчивости микрозеркальных чипов.

Модуляторы. Модулятор определяет важнейшие параметры проектора, такие как разрешающая способность, число градаций яркости, быстродействие и пр. Наиболее распространенным модулятором для проекторов является жидкокристаллическая (ЖК) матрица. Принцип действия ЖК-матрицы заключается в модуляции проходящего через ЖК-матрицу света за счет изменения ориентации или других свойств ЖК. На рис. 6.42 схематично показаны принцип действия ЖК-ячейки и структура ЖК-матрицы.

Характерные размеры ЖК-матрицы для проекционных систем составляют от 20 до 150 мм по диагонали. Информационная емкость лежит в пределах от 640×480 до 1280×1024 и более элементов изображения. Существуют две разновидности ЖК-матриц: на базе аморфного и на базе поликристаллического кремния. Для повышения быстродействия и улучшения электрических характеристик для управления ЖК-матрицами используют тонкопленочные транзисторы (*TFT – Thin Film Transistor*).

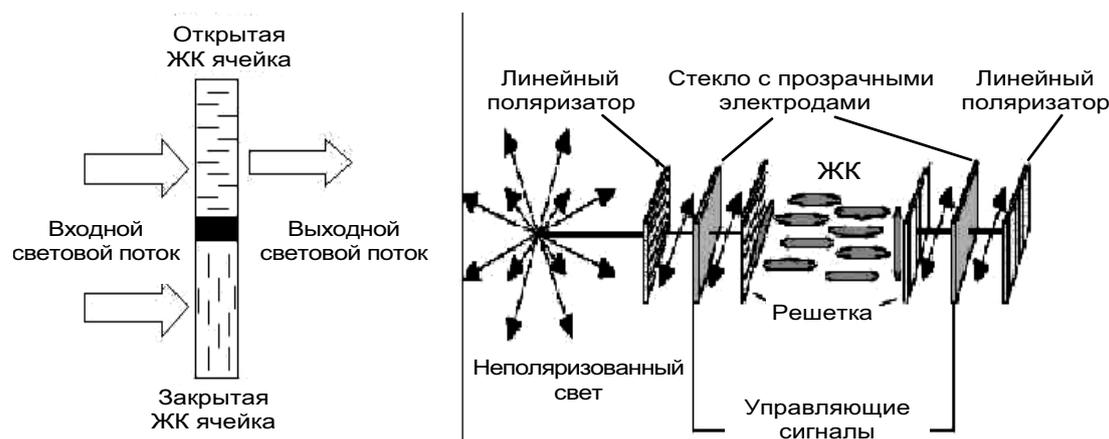


Рис. 6.42. Модулятор светового потока на основе жидкокристаллической матрицы

В последнее время появилось несколько новых типов модуляторов. Так, на смену ИЛА (*Image Light Amplifier* – усилитель яркости изображения) ЖК-матриц с фотоэлектронным слоем пришли разработанные фирмами JVC и Hughes D-ILA матрицы (*Direct Drive Image Light Amplifier* – электрически управляемый усилитель яркости изображения). D-ILA матрица работает на отражение, для чего в ней используются зеркальные катоды.

Технология D-ILA упаковывает 1,4 миллиона пикселей (1365×1024) на поверхность чипа, размером 23 мм по диагонали, благодаря чему появляется возможность полного отображения кадра формата 1280×1024 без сжатия или масштабирования, которые бы привели к потере информации на экране. Чипы D-ILA, построенные на базе но-

вейшей комплементарной металло-оксидно-полупроводниковой CMOS-технологии, являются ключевым фактором в обеспечении воспроизведения всех мельчайших деталей изображения (рис. 6.43).

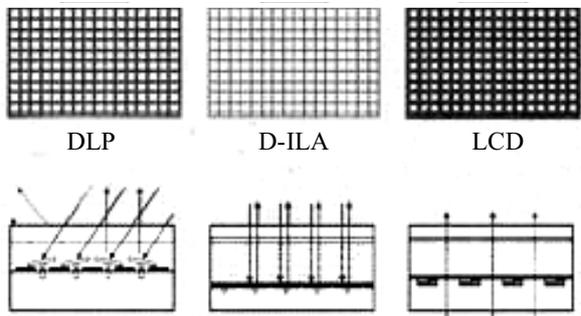


Рис. 6.43. Структурные схемы различных технологий, используемых в проекторах: D-ILA, LCD и DLP (Digital Light Processing, в основу этой микрозеркальной технологии компании Texas Instruments Inc. положены устройства DMD – Digital Mirror Device)

В чипе D-ILA переключатели и другие электронные компоненты, обеспечивающие адресацию к матрице, размещены прямо за светомодулирующим жидкокристаллическим слоем (а не между его отдельными участками) (рис. 6.43). В результате применения такой схемы коэффициент заполнения достигает 93 %, а изображение становится свободным от всяких досаждающих эффектов типа «взгляда через москитную сетку», проявляющихся при любых технологиях, использующих фиксированную матрицу. Благодаря CMOS-технологии получается очень гладкое, контрастное и яркое изображение.

D-ILA матрица (рис. 6.44) имеет разрешение 1365×1024 пикселей (аналогичная LCD матрица имеет разрешение 1024×768 пикселей). Такое разрешение позволяет без какого-либо преобразования воспроизводить изображение в том виде, в каком сигнал поступает с источника. Проекторы, использующие D-ILA матрицы (рис. 6.45) позволяют проецировать изображение телевидения высокой четкости с полным разрешением.

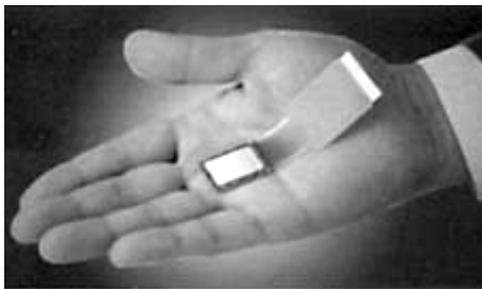


Рис. 6.44. D-ILA матрица

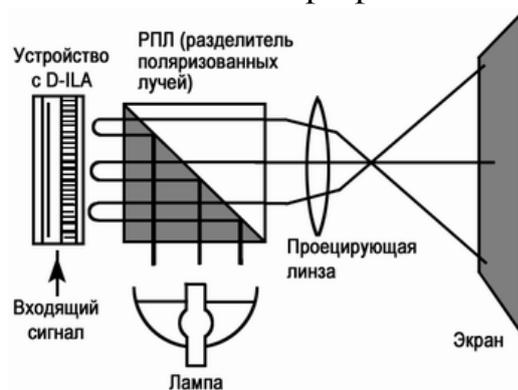


Рис. 6.45. Принципиальная схема проектора на основе D-ILA матрицы

Яркость проекторов D-ILA технологии в 1,5...2 раза выше аналогичных по мощности LCD проекторов.

Неотъемлемой частью конструкции устройства D-ILA является уникальный, жидкокристаллический слой, обеспечивающий превосходный коэффициент контрастности – теоретически до 2000:1 (для самого устройства). Именно этот основной элемент обеспечивает им динамический яркостный диапазон – от глубочайшего черного до ярчайшего белого, недостижимый ни при какой другой технологии.

Также появился целый ряд MEMS (*Micro Electromechanical System* – микроэлектромеханические системы) матриц, основанных на электрически управляемом изменении угла наклона или формы микрозеркал. Такие системы имеют очень высокое быстродействие (время переключения микрозеркала около 20 нс).

Наибольшее распространение получили DMD (*Digital Mirror Device* – цифровое микрозеркальное устройство) матрицы. Размер каждого зеркала 16×16 мкм², зазор между ними – 1 мкм (рис. 6.46).

DMD-матрицы имеют очень большой срок службы – не менее 30 лет непрерывной работы. Каждый пиксель DMD-матрицы представлен отдельным жестким поворотным зеркалом с двумя устойчивыми положениями. Именно с этим решением (в противоположность прежним вариантам с деформацией зеркал под действием аналогового сигнала) связано появление слова «цифровой» в названии устройства и технологии DMD. Проекторы на базе DMD-матриц называются DLP (*Digital Light Processing* – цифровая обработка света) проекторами.

При разработке DLP были найдены новые решения во всех основных элементах проекционных технологий: спроектированы источник света оригинальной конструкции, система охлаждения, эффективная оптика, учитывающая физиологию зрения блок обработки сигнала.

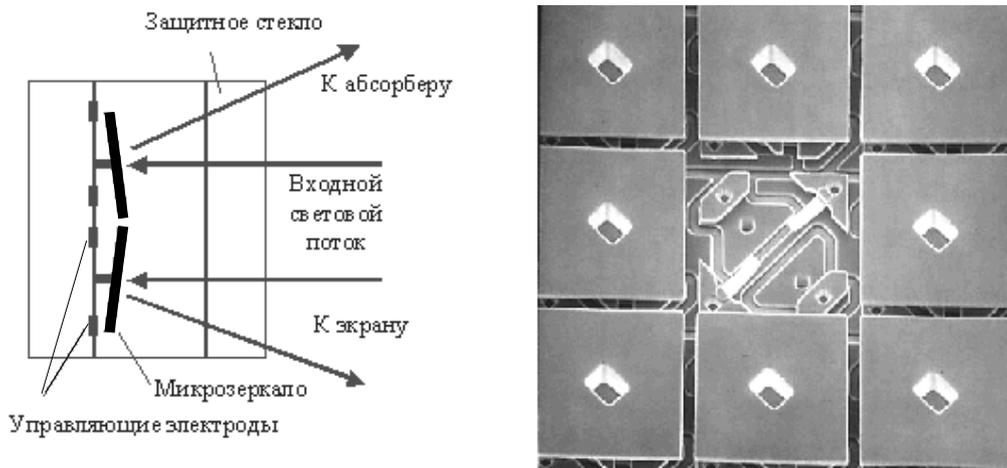


Рис. 6.46. Устройство DMD-кристалла

DMD-матрица представляет собой кремниевую пластину с прямоугольным массивом размещенных на ее поверхности отражающих элементов. Каждый такой элемент (рис. 6.46) содержит микрозеркало. Оно жестко прикреплено к подвижной индивидуальной подложке, которая, в свою очередь, соединена с неподвижным основанием посредством выступающих упругих пластин.

Под действием электрических импульсов, подаваемых на управляющие электроды, подложка с зеркалом переключается из одного устойчивого положения в другое (рис. 6.46). При работе устройства поворот осуществляется в одну или в другую сторону всегда на 10° (считая от горизонтального положения зеркала) – до упора. Это обеспечивает отклонение отраженного входного светового потока от -20 до $+20^\circ$ от нормали («переключение» светового потока от экрана к абсорберу и наоборот). При разработке DMD-матриц исследователи столкнулись со сложнейшей проблемой прилипания углов подложек к неподвижному основанию. Решить ее помогло создание нового покрытия с прилипанием вчетверо меньшим, чем у тефлона.

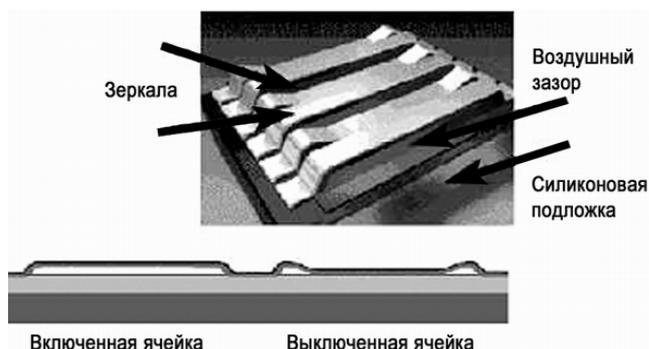


Рис. 6.47. Массив тонкопленочных микрозеркал

Еще одной разновидностью MEMS являются ТМА (*Thin film Micromirror Array* – массив тонкопленочных микрозеркал) (рис. 6.47). ТМА отличаются от DMD тем, что в них отклонение зеркал производится не электростатическим, а пьезоэлектрическим способом. Характерный размер микрозеркала – 97×97 мкм², зазор – 3 мкм. Достоинством ТМА-матриц является возможность получения полутонов в пределах одного обращения к ячейке.

Проблемы тепла. Практически вся лучистая энергия проекционной лампы фокусируется на модуляторе. Наиболее остро проблема тепла стоит для ЖК-матриц, так как вся световая энергия, не прошедшая через матрицу, поглощается ЖК. При повышенных температурах увеличивается деградация ЖК, вследствие чего теряется контраст изображения. Для отвода тепла используется воздушное принудительное ох-

лаждение. В матрицах с использованием микрозеркал тепловой режим не такой жесткий, так как та часть светового потока, которая не проецируется на экран, не рассеивается в матрице, а поступает на абсорбер, поглощающий до 98 % падающего на него света (см. рис. 6.46).

Экран. Пусть мы наблюдаем изображение, которое проецируется на экране. Основной функцией экрана является рассеивание поступающего светового потока. Поэтому целый ряд важных параметров изображения, таких как яркость, контраст, диаграмма направленности и пр., определяются и существенно зависят от оптических свойств экрана.

Фронтальная проекция и рир-проекция. Рассеивание может осуществляться при отражении или при пропускании света. Соответственно, существуют два типа экранов: для фронтальной проекции, работающие на отражение и для рир-проекции (тыльной проекции), работающие на пропускание. Схема работы этих двух типов экранов показана на рис. 6.48.

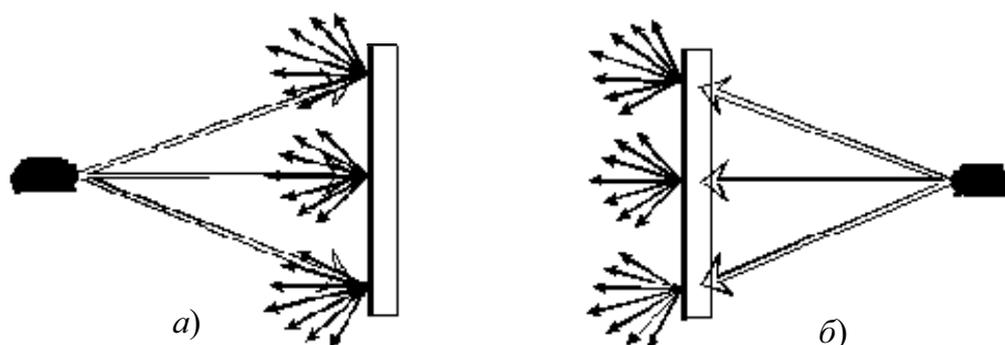


Рис. 6.48. Экраны для фронтальной проекции, работающие на отражение (а) и для рир-проекции (тыльной проекции), работающие на пропускание (б)

Выбор того или иного типа экрана определяется двумя основными соображениями: рир-проекционные экраны требуют дополнительного пространства проекции. Экраны фронтальной проекции требуют пониженной внешней освещенности.

Диаграмма направленности и коэффициент усиления экранов. Эти два параметра связаны друг с другом. Естественно, экран не может физически усиливать поступающий на него свет. Речь идет только о пространственном перераспределении падающего на экран света. Распределение светового потока в пространстве характеризуется диаграммой направленности экрана. Коэффициент усиления экрана есть отношение светового потока Φ_0 на нормали экрана к среднему световому потоку $\langle \Phi \rangle$, т. е. $K_\Phi = \Phi_0 / \langle \Phi \rangle$.

В случае диффузного (ламбертовского^{*)}) рассеяния экран имеет равномерную яркость в пределах 180° . При этом коэффициент усиления экрана $K_\Phi = 1$. Поверхность таких экранов покрывается специальными веществами, диффузно рассеивающими свет (например, углекислый магний $MgCO_3$).

Используя комбинированные покрытия из диффузно рассеивающих и отражающих веществ (например, диоксид титана TiO_2), можно в определенной мере формировать диаграмму направленности и коэффициент усиления. Комбинированное покрытие обычно имеет коэффициент усиления $K_\Phi = 1,5$.

Для рир-проекторных экранов используются полупрозрачные пленки, стекла с нанесенными пленочными покрытиями (например, из двуоксида кремния SiO_2) и т. д. Формирование диаграммы направленности в итоге служит для повышения яркости изображения на экране в требуемом направлении. Например, если наблюдение экрана производится не во всем 180° -градусном секторе, а только в 90° -градусном секторе по горизонтали и 45° -градусном секторе по вертикали, то, используя экран с двойным горизонтальным усилением и четырехкратным вертикальным усилением, можно поднять яркость на нормали экрана в 8 раз.

Простейшим способом формирования заданной диаграммы направленности является использование вогнутых экранов с заданной геометрией поверхности. Но по целому ряду причин это не всегда приемлемо. Для формирования диаграммы направленности с различными коэффициентами усиления в вертикальном и горизонтальном направлениях используются экраны с профилированной поверхностью (например, с горизонтальными алюминизированными канавками), экраны, покрытые микроскопическими стеклянными шариками диаметром в несколько десятков микрон (рис. 6.49, а), экраны с цилиндрическими (лентичулярными) линзами (рис. 6.49, б) и т. д.

При использовании в экранах методов оптического формирования диаграммы направленности, могут быть получены достаточно узкие диаграммы с большим коэффициентом усиления K_Φ (20 и более). В самых совершенных экранах дополнительно к цилиндрическим (лентичулярным) линзам применяются линзы Френеля, позволяющие не только формировать заданные диаграммы направленности, но и частично корректировать неравномерность яркости на краях экрана.

^{*)} Согласно закону Ламберта яркость рассеивающей свет (диффузной) поверхности одинакова во всех направлениях. Из этого закона следует соотношение между силой света рассеивающей плоской поверхности по направлению нормали (I_0) и под углом α (I_α):
 $I_\alpha = I_0 \cos \alpha$.

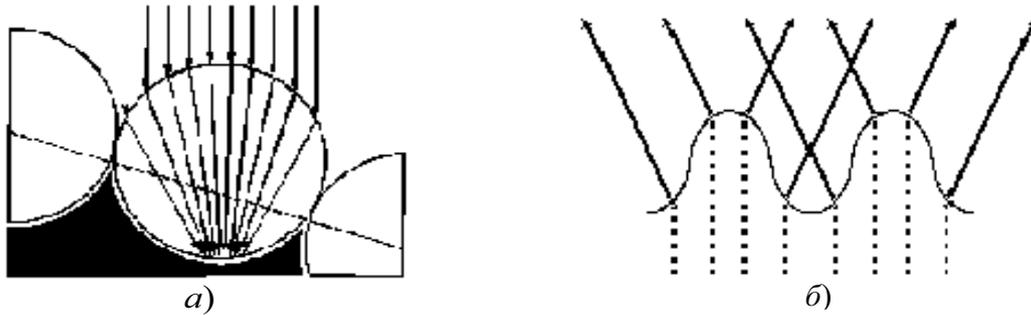


Рис. 6.49. Экраны со сферическими шариками (а) и цилиндрическими линзами (б)

6.11.2. Принципы работы цифровых печатающих устройств

Принцип получения изображения фотоспособом был изобретен уже более 100 лет назад, также как и производство фотобумаги. Достигнуты высокие показатели качества и сохранности изображения. Фотографии в альбоме хранятся более 100 лет.

Сегодня известны следующие технологии экспонирования цифрового изображения на фотобумагу в фотопринтерах:

- CRT (*cathode ray tube*) – электронно-лучевая трубка.
- MLVA (*micro light valve array*) – массив световых микроклапанов.
- Laser (*gas phase/solid state/diode*) – лазер в газовой фазе / твердом состоянии / лазерные диоды.
- DMD (*digital mirror device*) – массив цифровых зеркал.
- VF (*vacuum fluorescence*) – вакуумная флюоресценция.
- FOCRT (*fiber optic cathode ray tube*) – оптоволоконная электронно-лучевая трубка.
- LED (*light emitting diodes*) – светодиоды.
- LCD (*liquid crystal display*) – жидкокристаллический дисплей.

Электронно-лучевая трубка (CRT – *cathode ray tube*). Идея данной технологии довольно проста (рис. 6.50). Изображение загружается в машину, и производится цветоделение на 4 составляющие: красную, синюю, зеленую и составляющую яркости.

Затем на стол экспонирования подается лист фотобумаги, а на монитор выводится первая составляющая изображения. В это же время на турели со светофильтрами установлен такой же фильтр.

После экспонирования на монитор подается следующая составляющая изображения и свой светофильтр, и т. д. Данная технология

применяется сейчас для печати индексных отпечатков, т. к. существует проблема ухудшения резкости при увеличении изображения.

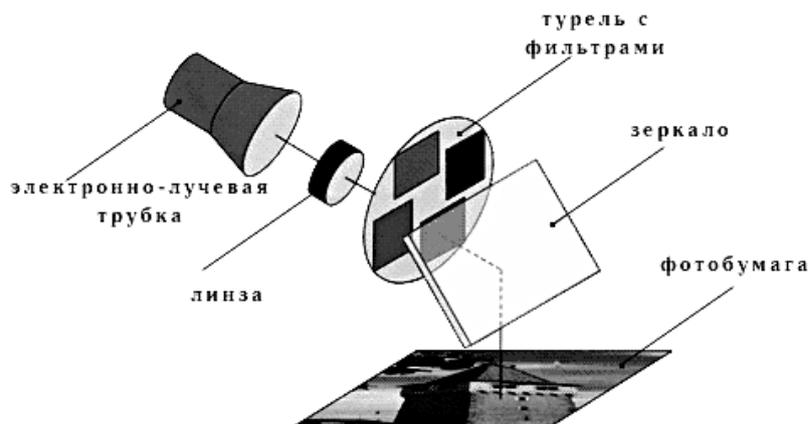


Рис. 6.50. Фотопечать с электронно-лучевой трубки

Массив световых микроклапанов (рис. 6.51). От постоянного источника света, в качестве которого может быть использован лазер, светодиод, полихроматическая лампа через фильтр и т. д., свет поступает по оптоволокну к головке с оптическими клапанами (рис. 6.52). В качестве оптических клапанов может быть использован жидкий кристалл (LCD), акустооптический модулятор (АОМ) и т. д.

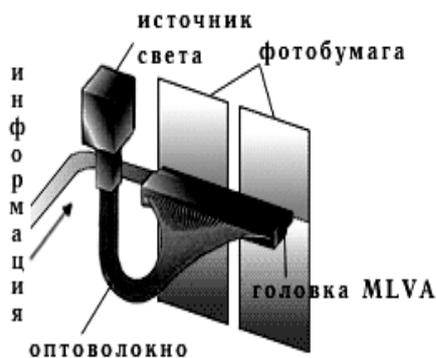


Рис. 6.51. MLVA-технология (массив световых микроклапанов)

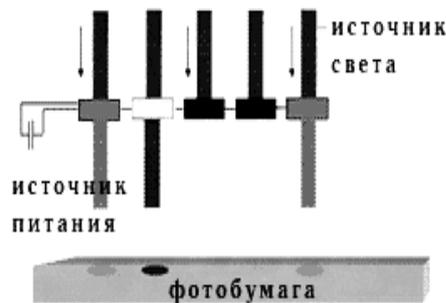


Рис. 6.52. Оптические клапаны

Прозрачность оптических клапанов меняется под воздействием электрического напряжения. Данные об изображении подаются на головку с клапанами. В нужной точке клапан открывается и пропускает свет, засвечивая фотобумагу.

Преимущество оптических клапанов заключается в том, что они могут находиться не только в двух положениях — «закрыто» и «открыто», но и имеют много промежуточных стадий, достигая таким образом разных оттенков по градации плотности. Между фотобумагой и оптическими клапанами находится массив оптоволокон или микролинз.

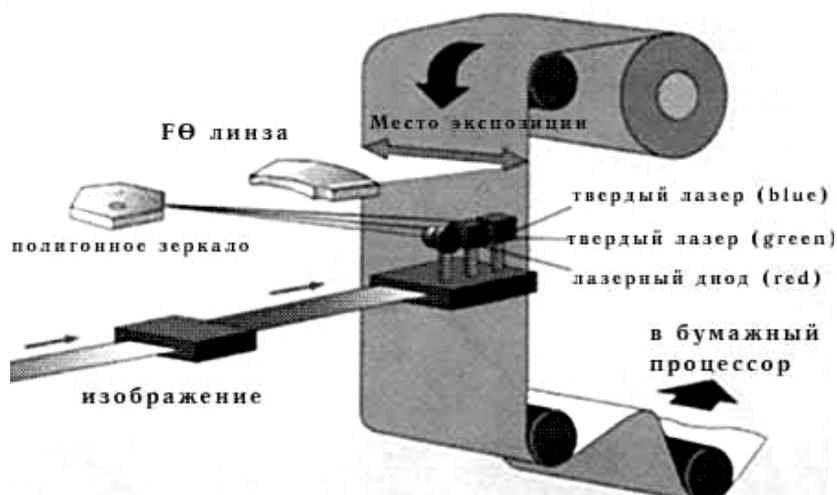


Рис. 6.53. Лазерная технология

Лазер. В данной технологии экспонирование фотобумаги происходит с помощью лазера (рис. 6.53). Перед подачей информации на лазер изображение также делится на 3 цветовых составляющих. Лучи лазера проходят сквозь призму и попадают на $F\theta$ линзу, с которой изображение и транспонируется на фотобумагу.

Массив цифровых зеркал (DMD – digital mirror device). Технология печати разработана на основе микрозеркальной матрицы, предназначенной для использования в видеопроекторах. Затем появились первые фотопринтеры, работающие на DMD. Микрозеркальная матрица – это массив микрозеркал размером 9 нм. Под воздействием напряжения зеркала поворачиваются и отражают свет – каждое зеркало для своей точки на бумаге (рис. 6.54).

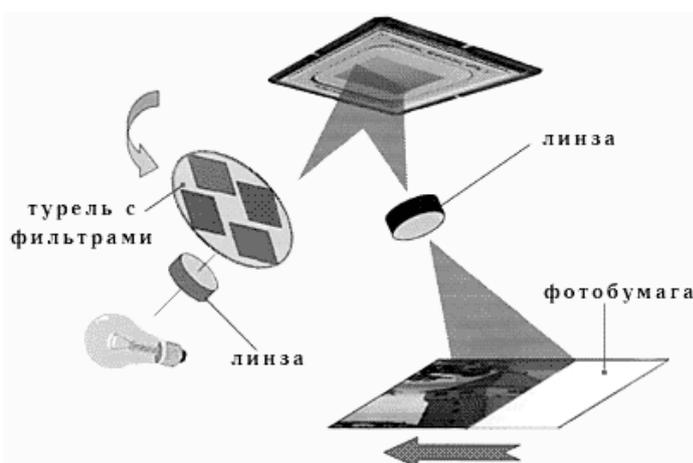


Рис. 6.54. Печать с использованием массива цифровых зеркал (DMD)

В DMD-технологии используется постоянный источник света и туфель со светофильтрами. Информация о каждой цветовой составляющей изображения подается в DMD-матрицу.

Оптоволоконная электронно-лучевая трубка (FOCRT – *fiber optic cathode ray tube*). Это самая проверенная временем и надежная технология. FOCRT представляет собой специальный кинескоп, у которого размер экрана всего 31×2 см², а на поверхности экрана смонтирован специальный блок из трех оптоволоконных светофильтров (рис. 6.55).

Все поле экрана разделено на 3 зоны – для трех цветов. Во время экспонирования фотобумага плотно прижимается к трубке и движется мимо нее. В это время на трубке отображается изображение и прокручивается со скоростью, равной скорости протяжки фотобумаги. Конечно, изображение отображается не как в телевизоре, оно так же, как и в других технологиях, делится на 3 цветные составляющие, и каждая составляющая выводится на экран в своем месте.

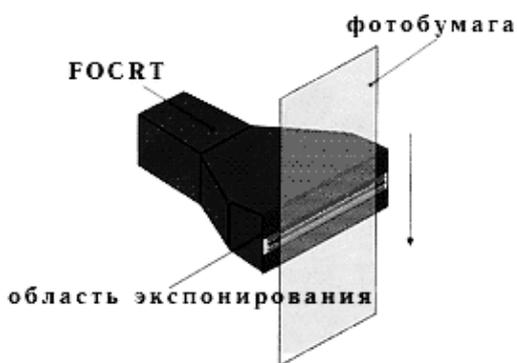


Рис. 6.55. Оптоволоконная электронно-лучевая трубка

Таким образом, если рассматривать одну точку на фотобумаге, то по ходу движения она засвечивается по очереди тремя цветами, получая таким образом полноцветное изображение (рис. 6.55).

6.12. Наноматериалы и нанотехнологии

Введение. Физика низкоразмерных структур – наиболее динамично развивающаяся область современной физики твердого тела. Интерес к этой области связан как с принципиально новыми фундаментальными научными проблемами и физическими явлениями, так и с перспективами создания на основе уже открытых явлений совершенно новых квантовых устройств и систем с широкими функциональными возможностями для опто- и наноэлектроники, измерительной техники, информационных технологий нового поколения, средств связи и пр. Сама десятичная приставка «нано» происходит от греческого слова «*nanos*», что переводится как «карлик» и означает одну миллиардную часть чего-либо. Таким образом, формально в сферу этой деятельности

попадают объекты с размерами d (хотя бы вдоль одной координаты), измеряемыми нанометрами. Результатом исследований низкоразмерных систем стало открытие принципиально новых, а теперь уже широко известных явлений, таких как целочисленный и дробный квантовый эффект Холла в двумерном электронном газе, вигнеровская кристаллизация квазидвумерных электронов и дырок, обнаружение новых композитных квазичастиц и электронных возбуждений с дробными зарядами, высокочастотных блоховских осцилляций, и многое другое.

Современные полупроводниковые лазеры на гетеропереходах также основаны на использовании низкоразмерных систем (структуры с квантовыми ямами, самоорганизованными квантовыми точками и квантовыми нитями). Наиболее выдающиеся достижения в этой области отмечены тремя Нобелевскими премиями по физике (1985 г. — за открытие квантового эффекта Холла; 1998 г. — за открытие дробного квантового эффекта Холла; 2000 г. — за труды, заложившие основы современных информационных технологий).

Развитие этой области открыло возможности конструирования средствами зонной инженерии и инженерии волновых функций и последующего изготовления с помощью современных высоких технологий наноструктур (сверхрешетки, квантовые ямы, точки и нити, квантовые контакты, атомные кластеры и т. д.) с электронным спектром и свойствами, требуемыми для обнаружения и изучения новых физических явлений или для соответствующих приложений.

Элементная база, основанная на использовании низкоразмерных структур, является наиболее перспективной для электронной техники новых поколений. При переходе к системам нанометрового масштаба начинает отчетливо проявляться квантово-механическая природа квазичастиц в твердом теле. Возникает принципиально новая ситуация, когда квантовые эффекты (размерное квантование, конфайнмент, туннелирование, интерференция электронных состояний и др.) будут играть ключевую роль в физических процессах в таких объектах и в функционировании приборов на их основе.

Наноматериалы. Если при уменьшении объема какого-либо вещества по одной, двум или трем координатам до размеров нанометрового масштаба возникает новое качество или это качество возникает в композиции из таких объектов, то эти образования следует отнести к наноматериалам, а технологии их получения и дальнейшую работу с ними — к нанотехнологиям. Подавляющее большинство новых физических явлений на наномасштабах проистекает из волновой природы частиц

(электронов и т. д.), поведение которых подчиняется законам квантовой механики. Проще всего это пояснить на примере полупроводников. Когда по одной или нескольким координатам размеры становятся порядка или меньше длины волны де Бройля для носителей заряда, полупроводниковая структура становится резонатором, а спектр носителей заряда – дискретным (см. рис. 6.20). То же самое с рентгеновскими зеркалами. Толщины слоев, способных отражать в фазе рентгеновское излучение, находятся в нанометровом диапазоне.

Полупроводниковые наноструктуры. Используя методы «зонной инженерии» и «инженерии волновых функций», можно конструировать квантово-размерные структуры с заданным электронным спектром и требуемыми оптическими, электрическими и другими свойствами (см. рис. 6.23 и 6.24). Поэтому они очень удобны при изготовлении приборов (рис. 6.56).

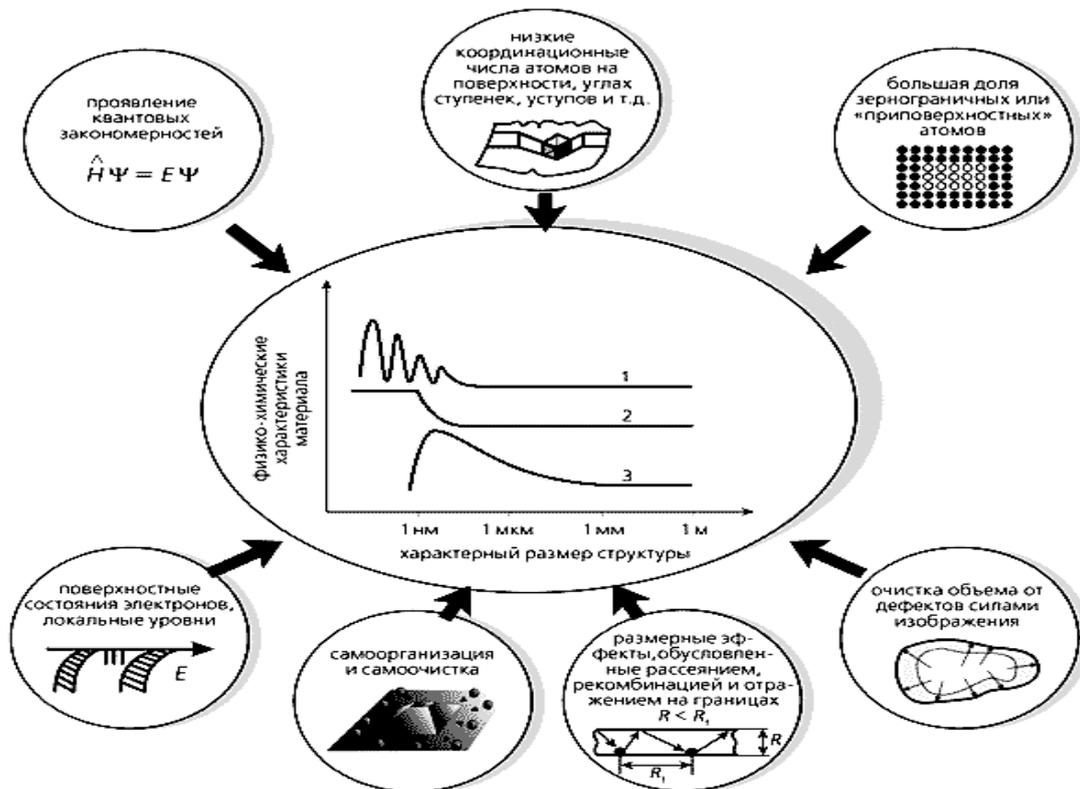


Рис. 6.56. Примеры специфического поведения вещества на субмикронном масштабном уровне и основные причины специфики нанообъектов: 1 – осциллирующий характер изменения свойств; 2 – рост характеристики с насыщением; 3 – рост характеристики с максимумом

Квантовые ямы. Этим термином обозначаются системы, в которых имеется размерное квантование движения носителей заряда в одном

направлении (см. рис. 6.20). Основные физические явления в квантовых ямах: размерное квантование электронного спектра, квантовый эффект Холла (целочисленный и дробный). Основные методы получения квантовых ям на гетероструктурах: металлоорганическая газовая и молекулярно-пучковая эпитаксия.

Приборные применения: высокочастотные полевые транзисторы с высокой подвижностью электронов, полупроводниковые гетеролазеры и светодиоды от ближнего ИК до голубого света, лазеры дальнего ИК-диапазона, параметрические источники света среднего ИК-диапазона, фотоприемники среднего ИК-диапазона, примесные фотоприемники дальнего ИК-диапазона, приемники дальнего ИК-диапазона на квантовом эффекте Холла, модуляторы в ближнем ИК-диапазоне.

Квантовые проволоки — это системы, в которых движение носителей заряда квантовано в двух направлениях. Первые квантовые проволоки выполнялись на основе квантовых ям посредством создания потенциального рельефа с помощью двух затворов, расположенных над квантовой ямой. Основные физические явления в квантовых проволоках: квантование проводимости, сильно коррелированный электронный транспорт. Основные методы получения квантовых проволок те же, что и квантовых ям, плюс использование прецизионного травления или специальных затворов. Приборных применений пока нет.

Квантовые точки — нанобъекты, в которых движение носителей заряда квантовано во всех трех направлениях. Имеют дискретный энергетический спектр (искусственный атом, см. рис. 6.21). Основные физические явления в квантовых точках: одноэлектронные и однофотонные явления. Методы получения те же, что и для квантовых ям. Или использование прецизионной литографии для создания квантовых точек из квантовых ям.

Приборные применения: лазеры и светодиоды в ближнем ИК-диапазоне, фотоприемники для среднего ИК-диапазона, однофотонные приемники, однофотонные генераторы, одноэлектронные транзисторы.

Структуры с туннельно-прозрачными барьерами (системы квантовых ям и сверхрешетки). Основные физические явления в таких системах: резонансное туннелирование; формирование минизонного спектра в сверхрешетках — периодических системах, содержащих много квантовых ям, разделенных туннельно-прозрачными барьерами; нелинейные электрические и оптические явления в сверхрешетках. Методы выращивания этих структур те же, что и для квантовых ям.

Применение в области приборостроения: резонансно-туннельные диоды (генераторы и смесители в гигагерцовом и терагерцовом диапазонах); мощные генераторы и смесители на сверхрешетках: каскадные лазеры среднего и дальнего ИК-диапазонов.

Фотонные кристаллы — системы, в которых имеется зонный спектр для фотонов. Основные физические явления: отсутствие пропускания (полное отражение) света в определенном диапазоне частот, резонансные фотонные состояния. Существует несколько методов выполнения фотонных кристаллов, но все они пока несовершенны.

Возможные приборные применения: эффективные лазеры с низкими пороговыми токами, системы управления световыми потоками.

Магнитные наноструктуры. Развитие методов напыления сверхтонких пленок и нанолитографии привело в последнее десятилетие к активному изучению магнитных наноструктур. Стимулом этой активности является идея о создании новых магнитных наноматериалов для сверхплотной записи и хранения информации. Предполагается, что каждая частица несет один бит информации. При расстоянии между частицами 100 нм ожидаемая плотность записи — 10 Гбит/см². Принципиальными ограничениями плотности записи при таком подходе являются магнитостатическое взаимодействие частиц и значительные термические флуктуации. Последние имеют существенную специфику для малых ферромагнитных частиц, которая проявляется в экспоненциальном росте вероятности распада намагниченного состояния с уменьшением размера частицы (суперпарамагнетизм).

Достижением в исследовании магнетизма наноматериалов служит открытие эффекта гигантского магнетосопротивления. Эффект состоит в изменении сопротивления (порядка нескольких десятков процентов) многослойной структуры из сверхтонких ферромагнитных и диамагнитных слоев (например, Co/Cu) при смене ферромагнитного упорядочения в структуре на антиферромагнитное. Такие многослойные структуры представляют новый тип доменной структуры ферромагнетика, в котором роль доменов играют ферромагнитные пленки, а доменными стенками являются пленки диамагнетика. Эффект применяется при создании датчиков магнитного поля, а также при разработке сред для сверхплотной записи информации.

Было также открыто явление туннелирования магнитного момента в сверхмалых ферромагнитных частицах, искусственных кристаллах, содержащих магнитные кластеры Mn₁₂ и Fe₃. Магнитный момент кластеров равен 10 магнетонам Бора и занимает промежуточное положение

ние между магнитным моментом атомов и макроскопических частиц. Обменное взаимодействие между кластерами в кристалле отсутствует, а магнитная анизотропия высока. Появляется возможность квантовых переходов между магнитными равновесными состояниями в кластерах. Изучение этих процессов представляется интересным и важным с точки зрения разработки элементной базы квантовых компьютеров.

Двумерные многослойные структуры из пленок нанометровой толщины. В данном случае рассматриваются такие комбинации материалов, которые обеспечивают наиболее сильное отражение электромагнитных волн. Длина волны излучения, эффективно взаимодействующего с многослойной структурой, и ее период связаны соотношением $n\lambda = 2d\sin\alpha$, где α – угол скольжения падающего луча, n – целое число (условие Брэгга–Вульфа). Диапазон длин волн, в котором эффективно использование этих устройств, простирается от экстремального ультрафиолетового излучения ($\lambda = 60$ нм) до жесткого рентгеновского ($\lambda = 0,01$ нм), т. е. диапазон, в котором наиболее длинные волны в 6000 раз больше самых коротких. Структуры представляют собой искусственные одномерные кристаллы из пленок нанометровой толщины, и, кроме возможности их использовать для управления излучением в зависимости от материалов слоев (диэлектрик, полупроводник, металл, сверхпроводник), могут быть интересны и для других физических приложений. Так, если одним из материалов многослойных наноструктур служит сверхпроводник, то это система множественных, последовательно включенных, совершенно идентичных джозефсоновских переходов (см. п. 3.10). Если металл чередуется с полупроводником – это система последовательно включенных диодов (барьеров) Шотки.

В наиболее коротковолновой части диапазона 0,01...0,02 нм рентгеновские зеркала позволяют фокусировать излучение синхротронов или рентгеновских трубок на исследуемые объекты или формировать параллельные пучки. Их применение увеличивает эффективность рентгеновских трубок в 30...100 раз, что делает возможным заменить синхротронное излучение в ряде биологических, структурных и материаловедческих исследований.

В диапазоне 0,6...6 нм лежит характеристическое излучение легких элементов от бора до фосфора. Здесь рентгеновские зеркала также используются для исследования спектров в приборах элементного анализа материалов.

Рентгеновская многослойная оптика широко применяется для формирования фильтрации и управления поляризацией в синхротрон-

ных источниках. В области 10...60 нм лежат линии излучения солнечной плазмы. Объективы космических телескопов из рентгеновских зеркал и сейчас находятся на орбите и регулярно передают на Землю изображение Солнца на характеристических линиях железа (17,5 нм) и гелия (30,4 нм).

Особое место занимает применение многослойных зеркал в технологиях микроэлектроники. Мы являемся свидетелями и участниками крупнейшего события в твердотельной электронике: это переход в литографии на длину волны более чем в 10 раз короче (от 157 нм к 13 нм) – процессе, обеспечивающем получение рисунка полупроводниковых приборов и интегральных схем. Длина волны излучения, используемого для получения рисунка, определяет минимальные размеры его элементов. Одновременно в 10 раз повышаются требования к точности изготовления всех элементов оптики и механизмам настройки и экспонирования. Фактически это означает переход всех обрабатывающих технологий на атомарную точность. Неучастие в этом процессе может оставить нашу страну в прошлом.

Молекулярные наноструктуры. Органические материалы в последнее время интенсивно вовлекаются в нанотехнологии как неотъемлемые участники технологического процесса (например, в нанолитографии), и как самостоятельные объекты и устройства в молекулярной электронике.

Многообразие органического мира хорошо известно (около 2 млн синтезированных соединений, и это количество непрерывно растет) от «полунеорганических» комплексов (углеродные кластеры, металлоорганика) до биологических объектов (ДНК, гены). Среди материалов, применяемых в нанотехнологиях и молекулярной электронике, условно можно выделить три основных класса: полимеры, молекулярные ансамбли нанометровых размеров (*molecular assemblies, selfaggregated systems*) и единичные органические молекулы; последние называются также «умные» или «функциональные» молекулы (*smart molecules*).

Первый класс – полимеры – изучается наиболее давно и по общей совокупности работ, наверное, наиболее интенсивно. Кроме того, диэлектрические, оптические и люминесцентные свойства различных поли- и олигомеров уже широко используют в технике и электронике, они стоят ближе всего к рынку и экономическому эффекту.

Второй класс – молекулярные ансамбли нанометровых размеров – изучается сравнительно недавно. К ним относятся, например, агрегаты на основе порфиринов (в том числе хлоро-

филла) и других амфифильных молекул, получаемые из растворов. Супрамолекулярная (т. е. надмолекулярная, иерархическая) организация сложна и интересна, ее исследование и связь с (фото-) электрическими свойствами проливает свет на биологические и природные процессы (клеточный транспорт, фотосинтез). Обнаружена чувствительность и уникальная избирательность таких систем к внешним воздействиям (свет, атмосфера, вибрация). Это позволяет использовать их в различных сенсорах, в том числе со смешанной электронно-ионной проводимостью. Исследуются наноразмерные молекулярные стержни и проволоки (*molecular rods and wires*), в том числе в качестве интерфейса между неорганическими материалами (например, двумя металлическими электродами). Предполагается, что со временем будет происходить интегрирование с классической приборной базой.

Системы, построенные на вандерваальсовых или водородных связях, очень перспективны с точки зрения дизайна твердого тела как объекта с двумя уровнями свободы: внутримолекулярная структура, которая может быть модифицирована (изменена при синтезе) и которая ответственна, например, за поглощение или испускание света; межмолекулярная структура, которая может быть изменена при росте кристалла (пленки, эпитаксиальные слои) и ответственна за фазовые явления, транспорт носителей заряда, магнитные свойства.

Важную группу составляют и самоорганизующиеся монослои (*self-assembled monolayers, SAM's*) на основе органических молекул или цепочек различного строения, которые рассматривают как перспективные передающие материалы при литографии, так и для изучения электропереноса вдоль контура сопряжения молекулы. Здесь уже начинается третий класс.

Третий класс – единичные органические молекулы, или способ применения органических материалов в нанотехнологиях – самый молодой. Он еще называется *emergent* или *futuristic technologies* (внезапно возникающие или футуристические технологии). Если жидкокристаллические дисплеи, технологии CD-R, фотопреобразователи, сенсоры и другие устройства на органических материалах хорошо известны и постепенно приходят на рынок, то одномолекулярные устройства (приборы) в реальном производстве отсутствуют. Истинно «наноразмерные» эффекты ожидаются именно в этом классе. Конструируются молекулярные наномшины и наномоторы (роторы), динамические молекулярные переключатели, транспортировщики энергии, устройства распознавания, хранения информации. Для исследова-

ния инъекции носителей и туннельного тока в отдельных молекулах совершенствуются методы зондовой микроскопии.

В числе главных достоинств органики находятся дешевизна и доступность. Наибольшие практические перспективы имеют исследование и оптимизация широко распространенных и изученных соединений с высокой стабильностью и способностью интегрирования в разработанные технологические процессы. Из наиболее известных — это фталоцианины, фуллерены, политиофены и полиарены.

Фуллереноподобные материалы. Графит, алмаз и не всеми признанный карбин в течение долгого времени считались основными аллотропными состояниями углерода. Их применяли во многих отраслях промышленности и техники, в том числе в микро- и оптоэлектронике. В 1985 г. Х. Крото с сотрудниками обнаружили в парах графита, полученных его испарением под лазерным пучком, кластеры (или многоатомные молекулы) углерода. Наиболее стабильными из них оказались C_{60} и C_{70} (рис. 6.57).

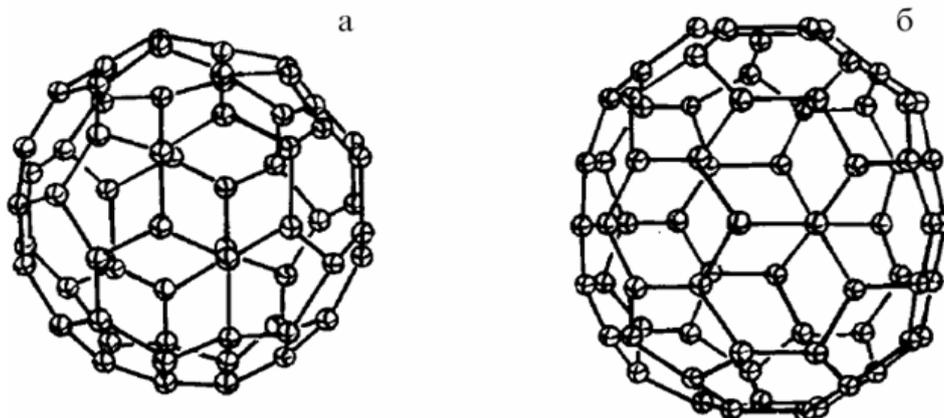


Рис. 6.57. Структура молекул фуллерена C_{60} (а) и C_{70} (б). В силу симметрии в молекуле C_{60} все атомы находятся в равнозначных условиях, тогда как в молекуле C_{70} имеется пять разных позиций атомов

Как выяснилось в результате структурного анализа, первый из них имел форму футбольного, а второй — регбийного мяча. Позднее их стали называть фуллеренами^{*)} в честь американского архитектора Р. Фуллера, получившего в 1954 г. патент на строительные конструкции в виде многогранных сфероидов для перекрытия больших помещений. Шарообразные (или дынеобразные) молекулы имеют необычную симметрию

^{*)} Фуллерены — аллотропные молекулярные формы углерода, в которых атомы расположены в вершинах правильных шести- и пятиугольников, покрывающих поверхность сферы или сфероида. Такие молекулы могут содержать 28, 32, 50, 60, 70, 76 и т. д. атомов С.

и уникальные свойства. Все ковалентные связи в них насыщены, и между собой они могут взаимодействовать только благодаря слабым ван-дерваальсовым силам. При этом последних хватает, чтобы построить из сферических молекул кристаллические структуры (фуллериты). К каждой такой молекуле можно «привить» другие атомы и молекулы, можно поместить чужеродный атом в центральную полость фуллереновой молекулы, как в суперпрочный контейнер, или полимеризовать их, раскрыв внутренние связи, и т. д. Впоследствии научились выращивать однослойные и многослойные углеродные нанотрубки (рис. 6.58).



Рис. 6.58. Участок фуллереновой нанотрубки (10,10) с одним открытым концом и продуктами присоединения

Крайне важно, что свойствами нанотрубок удается управлять, изменяя их хиральность — симметрию скрученности решетки относительно продольной оси. При этом легко можно получить проволоку нанометрового диаметра как с металлическим типом проводимости, так и с запрещенной зоной заданной ширины. Соединение двух таких нанотрубок образует диод, а трубка, лежащая на поверхности окисленной кремниевой пластинки, — канал полевого транзистора. Такие наноэлектронные устройства уже созданы и показали свою работоспособность. Нанотрубки с регулируемым внутренним диаметром служат основой идеальных молекулярных сит высокой селективности и газопроницаемости, контейнеров для хранения газообразного топлива, катализаторов.

Кроме того, нанотрубки могут использоваться как сенсоры, атомарно острые иголки, элементы экранов дисплеев сверхвысокого разрешения. Самоорганизация фуллереновых структур происходит повсюду: в космосе, в природных процессах на Земле, в промышленных процессах (черная металлургия) и лабораториях. Свойства и структура этих материалов настолько разнообразны и интересны, что фуллереновые материалы начинают широко применять в промышленности: от микро- и наноэлектроники до эффективных медицинских препаратов.

Патентная литература и применения фуллереноподобных материалов чрезвычайно разнообразны. Фуллереноподобные материалы обладают рядом замечательных характеристик, включая химическую стойкость, высокую прочность, жесткость, ударную вязкость, теплопроводность и (что, возможно, важнее всего) электропроводность. В зависимости от тонких особенностей молекулярной симметрии фуллерены и нанотрубки могут быть диэлектриками, полупроводниками, обладать металлической проводимостью и высокотемпературной сверхпроводимостью. Эти свойства в сочетании с наномасштабной геометрией делают их почти идеальными, возможно, даже уникальными материалами для изготовления электрических проводов, сверхпроводящих соединений или целых устройств, которые с полным основанием можно назвать изделиями молекулярной электроники. Химической сборке элементов различных схем благоприятствуют свойства фуллерена, который может образовывать ионы от $+6$ до -6 , а в различных матрицах — связи с донорами, акцепторами, свободными радикалами и ионами. Фуллерены могут также использоваться при создании средств молекулярной оптоэлектроники для фемтосекундной оптоволоконной передачи информации. Полимеризация фуллеренов при электроннолучевом или ионизирующем воздействии дает возможность получать резисты^{*)} нового поколения.

Углеродные нанотрубки используются в качестве игольчатых щупов сканирующих зондовых микроскопов и в дисплеях с полевой эмиссией, в высокопрочных композиционных материалах, электронных устройствах со схемами из коротких нанотрубок, подвергнутых манипулированию и сборке. Молекулярный характер фуллереновых материалов позволяет разработать химическую стратегию сборки этих элементов в пригодные для использования структуры, материалы и, возможно, даже молекулярные электронные устройства.

Конструкционные наноматериалы. Использование современных конструкционных материалов ограничивается тем, что увеличение прочности приводит к снижению пластичности. На основе нанокompозитов можно создать новый тип материалов, сочетающих высокую прочность и пластичность. Высоких прочностных показателей можно добиваться двумя прямо противоположными способами: снижая концентрацию дефектов структуры (в пределе приближаясь к идеальному

^{*)} Резисты — органические материалы, чувствительные к воздействию какого-либо излучения: оптического (фоторезисты), рентгеновского (рентгенорезисты), потока электронов или ионов (электронно- или ионорезисты). Применяют в литографии для формирования заданного рельефного рисунка на поверхности печатной формы и ее защиты от воздействия травителей.

монокристаллическому состоянию) или, наоборот, увеличивая ее вплоть до создания мелкодисперсного нанокристаллического или аморфного состояния. Оба пути широко используют в современном физическом материаловедении и производстве (рис. 6.59).

Высока перспективность следующих направлений в области разработки конструкционных материалов: изготовление наноструктурных керамических и композиционных изделий точной формы, создание наноструктурных твердых сплавов для производства режущих инструментов с повышенной износостойкостью и ударной вязкостью, создание наноструктурных защитных термо- и коррозионно-стойких покрытий, создание обладающих повышенной прочностью и низкой воспламеняемостью полимерных композитов с наполнителями из наночастиц и нанотрубок.

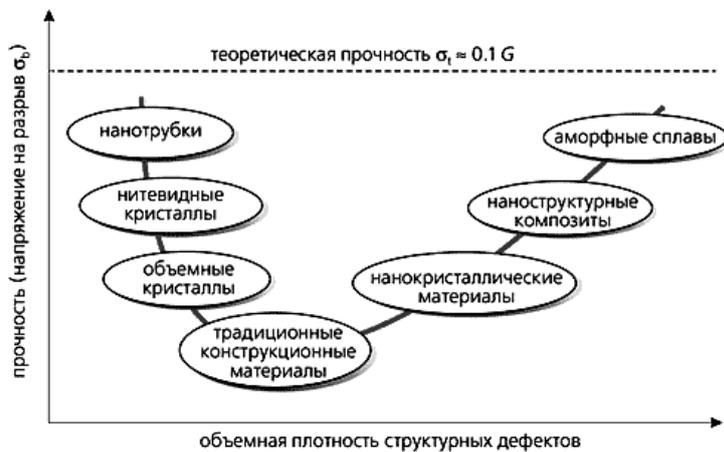


Рис. 6.59. Схематическая зависимость прочности от плотности атомарных дефектов в материале: G — модуль сдвига

Разработаны составы и технологии нанесения сверхтвердых покрытий толщиной около 1 мкм, уступающих по твердости только алмазу. При этом резко увеличивается износостойкость режущего инструмента, жаростойкость, коррозионная стойкость изделия, сделанного из сравнительно дешевого материала. По пленочной технологии можно создавать не только сплошные или островковые покрытия, но и щетинообразные, с упорядоченным расположением нановорсинок одинаковой толщины и высоты. Они могут работать как сенсоры, элементы экранов высокого разрешения и в других приложениях.

Получены образцы изделий из нанофазной керамики (плотности на уровне 0,98...0,99 от теоретического значения) на основе оксидов алюминия и ряда переходных металлов. Плотная наноструктурная керамика имеет повышенную пластичность при сравнительно невысоких температурах. Увеличение пластичности при уменьшении размера частиц вызвано сдвиговым перемещением нанокристаллических зерен относительно друг друга при наложении нагрузки. Отсутствие наруше-

ния межзеренной связи объясняется эффективным диффузионным переносом атомов в приповерхностном слое частиц. В перспективе повышенная пластичность означает возможность сверхпластичного формирования керамических и композиционных изделий, что исключает необходимость трудо- и энергозатратной финишной обработки материалов высокой твердости.

В последние годы разработаны нанокompозитные металлокерамические материалы, в частности, на основе WC/Co и TiC/Fe, значительно превосходящие по износостойкости, прочности и ударной вязкости аналоги с обычной микроструктурой. Повышенные эксплуатационные характеристики нанокompозитных материалов обусловлены образованием при спекании специфических непрерывных нитевидных структур, формирующихся в результате трехмерных контактов между наночастицами разных фаз.

Повышение коррозионной стойкости наноструктурных покрытий обусловлено, в первую очередь, снижением удельной концентрации примесей на поверхности зерен по мере уменьшения их размеров. Более чистая поверхность обеспечивает более однородную морфологию и более высокую коррозионную стойкость межзеренных границ. Наноструктурные покрытия характеризуются сверхвысокой прочностью. Один из основных механизмов упрочнения обусловлен эффектом скопления дислокаций вблизи препятствий, которыми при уменьшении размеров зерен являются их границы. Преимуществом покрытий с наноразмерной структурой является обусловленная повышенной пластичностью возможность снижения в них остаточных напряжений, что позволяет изготавливать покрытия миллиметровой толщины.

Использование диспергированных в полимерной матрице неорганических наполнителей из наноразмерных порошков позволяет существенно повысить огнестойкость пластмасс, являющуюся одним из основных недостатков при использовании их в качестве конструкционных материалов. Результаты исследований показывают, что снижение горючести может быть доведено до самозатухания пламени. Наноразмерные порошковые наполнители не снижают механической прочности и обрабатываемости материалов. Полимерные нанокompозиты обладают высокой абляционной стойкостью^{*)}, что открывает перспективы их использования для защиты поверхности изделий, эксплуатируемых в условиях воздействия высоких температур.

^{*)} Абляция — унос веществ с поверхности твердого тела потоком горячего газа (путем эрозии, оплавления, сублимации). На абляции может быть основана защита космических аппаратов и головных частей ракет-носителей при входе в атмосферу, а также охлаждение камер ракетных двигателей.

Нанoeлектроника. Основные методы создания тонкопленочных структур можно разбить на два больших класса, базирующихся на физическом (в первую очередь, молекулярно-лучевой эпитаксии) и химическом осаждении. При малой толщине (до нескольких атомных слоев) двумерная подвижность осаждаемых на подложку атомов может быть очень высокой. В результате быстрой диффузии по поверхности происходит самосборка нанообъектов, обладающих ярко выраженными квантовыми свойствами. Так образуются квантовые точки, квантовые ямы, квантовые проволоки, кольца и др. Если систему квантовых точек покрыть слоем инертного материала, а затем снова напылить активный материал, то опять образуются островки, самоупорядочивающиеся на поверхности и даже скоррелированные с положением их предшественников. Повторяя такие процедуры множество раз, можно получить объемно упорядоченные структуры (квазирешетки) из квантовых ям или точек, называемые гетероструктурами, и сделать на их основе лазерные источники света, фотоприемники (в том числе инфракрасного излучения в области длин волн 8...14 мкм, соответствующей максимуму теплового излучения человеческого тела), накопители информации. Вся современная микроэлектроника базируется на планарных полупроводниковых технологиях, которые дают возможность создавать самые разнообразные многослойные тонкопленочные структуры с функциями сенсоров, логической и арифметической обработки сигнала, его хранения и передачи.

Нанoeлектроника следующих поколений. Любые достижения в нанонауке сначала рассматриваются с точки зрения их применения в информационных технологиях. Можно выделить несколько крупных направлений на этом участке работ:

- 1) уже упоминавшиеся различные устройства на углеродных нанотрубках;
- 2) одноэлектроника, спинтроника и джозефсоновская электроника, в том числе квантовые компьютеры;
- 3) молекулярная электроника, в частности с использованием фрагментов ДНК;
- 4) сканирующие зондовые методы.

Несмотря на нарастающий уровень трудностей, в течение трех последних десятилетий поддерживается неизменный и очень высокий темп роста всех существенных характеристик в микроэлектронике (рис. 6.60). Наиболее революционные достижения приближаются к квантовым пределам, положенным самой Природой — когда работает один электрон, один спин, квант магнитного потока, энергии и т. д. Это сулит быстрое действие порядка терагерц ($\sim 10^{12}$ операций в секунду), плотность записи ин-

формации $\sim 10^3$ Тбит/см², что на много порядков выше, чем достигнутые сегодня, а энергопотребление – на несколько порядков ниже. При такой плотности записи в жестком диске, размером с наручные часы, можно было бы разместить громадную библиотеку национального масштаба или фотографии, отпечатки пальцев, медицинские карты и биографии абсолютно всех (!) жителей Земли. С принципиальной точки зрения для оперирования в двоичной системе исчисления необходимы элементы, которые способны реализовывать два устойчивых (стабильных во времени и неразрушаемых термическими флуктуациями) состояния, соответствующие «0» и «1», и допускать быстрое переключение между ними. Такие функции может выполнять электрон в двухуровневой системе (например, в двухатомной молекуле – перейти с одного атома на другой).

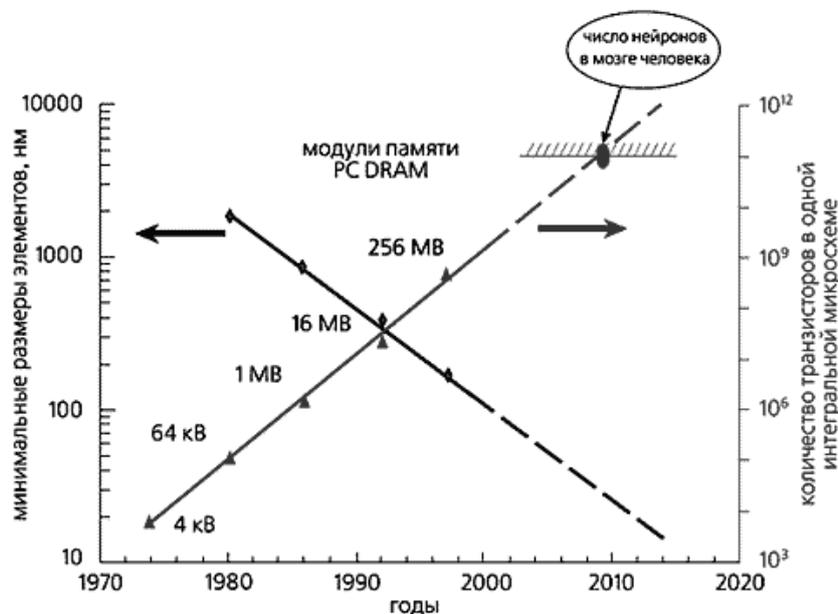


Рис. 6.60. Динамика развития микроэлектроники в предшествующие 30 лет и прогноз на следующее десятилетие на примере роста параметров больших интегральных схем оперативной памяти для персональных компьютеров

Это реализовало бы заветную мечту – одноэлектронное устройство. Пока лучшие современные электронные средства «тратят» сотни, тысячи электронов на одну операцию. Другая возможность – переориентировать спин электрона из одного устойчивого состояния в другое (например, воздействуя магнитным полем), чем и занимается спинтроника.

Магнитные квантовые эффекты задействованы также в работе сверхпроводящих элементов, включающих джозефсоновский переход. Последние представляют собой две сверхпроводящие пленки, разделенные тонким слоем (~ 1 нм) диэлектрика. Один или несколько джозефсоновских контактов включаются в обычную электрическую цепь. Электро-

ны в сверхпроводнике ведут себя скоррелированно, в результате чего ток и созданный им магнитный поток квантуются: в кольце из двух джозефсоновских контактов, включенных параллельно, может укладываться только целое число длин электронных волн, а внутри такого кольца может существовать не любой магнитный поток, а только кратный целому числу квантов магнитного потока. Это обеспечивает автоматический переход от аналогового способа представления информации к дискретному.

Элементы быстрой одноквантовой логики, в которых единицей информации служит квант магнитного потока, позволяют обрабатывать сигналы с частотами выше 100 ГГц при крайне низком уровне диссипации энергии. Такая структура является одновременно и логическим элементом, и ячейкой памяти. Трехмерные структуры, состоящие из сложенных в стопу джозефсоновских электронных схем, видятся сейчас как единственная альтернатива планарным полупроводниковым микросхемам.

Наноструктурированная джозефсоновская электроника как нельзя лучше подходит в качестве физической среды для конструирования квантовых компьютеров. На основе двумерных сеток джозефсоновских контактов может быть также создан новый тип компьютерной памяти, строящийся не на базе традиционной логики, а использующий ассоциативную, распределенную по всей структуре память, подобно нейронным сетям живых организмов. Такая система будет способна распознавать образы, принимать оперативные решения в многофакторных ситуациях (например, в экономике, оборонных задачах, космических исследованиях) в реальном времени без механического перебора всех возможных вариантов.

В физических лабораториях уже разработано множество джозефсоновских элементов и устройств для применения в качестве не только логических элементов и ячеек памяти, устройств квантового кодирования и передачи данных, но и генераторов, и приемников миллиметровых и субмиллиметровых излучений, а также высокочувствительных датчиков магнитного поля, электрического заряда, напряжения, тока, теплового потока и т. д. Подобные датчики при регистрации малых сигналов имеют чувствительность вблизи фундаментального квантового предела, т. е. в тысячи, десятки тысяч раз выше, чем у традиционных полупроводниковых устройств. Это позволяет использовать их в бесконтактной медицинской диагностике (магнитокардиографы, магнитоэнцефалографы). В настоящее время существует проблема в создании магнитной томографии, позволяющей по картине магнитного поля следить за функционированием органов, внутриутробным развитием плода в реальном масштабе времени.

Как реальная альтернатива «кремниевой» электронике в недалеком будущем многими специалистами рассматривается молекулярная электроника. Тому есть несколько причин. Природа создала за миллионы лет эволюции самые разнообразные молекулы, выполняющие все необходимые для сложного организма функции: сенсорные, логически-аналитические, запоминающие, двигательные. Зачем разрабатывать и производить искусственные структуры из отдельных атомов при наличии готовых строительных «блоков»? Тем более, они имеют оптимальную конфигурацию, структуру и нанометровые размеры. В настоящее время существующих фундаментальных знаний и нанотехнологий достаточно лишь для демонстрации принципиальных возможностей создания практически всех структур, необходимых для информационных технологий и микроробототехники. Однако нет сомнений, что в ближайшем будущем они будут играть важную роль во многих практических приложениях. Молекулярная электроника входит составной частью в более крупную отрасль – нанобиотехнологию, занимающуюся биообъектами и биопроцессами на молекулярном и клеточном уровне и держащую ключи к решению многих проблем экологии, медицины, здравоохранения, сельского хозяйства, национальной обороны и безопасности.

Нано- и микроэлектромеханика. Прогресс в разработке нано- и микроэлектромеханических устройств и систем обещает такую же революцию в технике, какую совершила микроэлектроника в электронике. Микроэлектромеханика стала самостоятельным направлением 15...20 лет назад. Основой этого направления является объединение поверхностной микрообработки, развитой в микроэлектронной технологии, с объемной обработкой и использование новых материалов и физических эффектов. Бурный рост микроэлектромеханики, являющейся, по сути, междисциплинарным направлением, связан, прежде всего, с широким использованием микроэлектронных технологий с сотовой микроструктурой. Такой подход позволил за короткое время создать новые объемные конструктивные элементы – мембраны, балки, полости, отверстия с большим аспектным соотношением (калибром) – за счет использования, так называемых, LiGA-технологий на основе синхротронного излучения и т. д. Это обеспечило прорыв в области микродвигателей микророботов, микронасосов для микрофлюидики (микротоков), сверхчувствительных сенсоров различных физических величин (давления, ускорения, температуры и др.), микрооптики. Так, микромеханические датчики в современных автомобилях являются основой систем безопасности (воздушные подушки), контроля за состоянием колес, подвески и т. п. Но наиболее ярким представителем микроэлектромеханических систем слу-

жат сканирующие зондовые микроскопы, являющиеся основой не только ряда измерительных систем в нанометровом диапазоне, но и основой технологических устройств для нанотехнологии.

Переход к наноэлектромеханике связан с использованием нанотехнологии и новых физических эффектов. Так, при создании полостей – важного компонента различных устройств – используются все в большей мере самоорганизующиеся процессы (углеродные нанотрубки, пористые мембраны на основе оксида алюминия). Это увеличивает воспроизводимость, повышает надежность, поскольку малейшие изменения размеров, связанные с использованием традиционных технологий, ведут к экспоненциально сильному изменению параметров.

В развитых странах этому направлению уделяется большое внимание: создаются исследовательские институты, развернута подготовка специалистов. Рассматриваемый круг вопросов – от ручки без разбрызгивания чернил до беспроводной передачи данных, оптических устройств управления оружием и мини-спутников. Агентство перспективных разработок Министерства обороны США реализует программу «Умная пыль», направленную на создание сверхминиатюрных устройств, способных генерировать энергию, проводить мониторинг окружающей среды, накапливать и передавать информацию.

Развитие нано- и микроэлектромеханики является необходимым условием развития основ нанотехнологии.

Технологические аспекты разработки нано- и микроэлектромеханических систем. Наноимпринтинг (печать с помощью штампа). Это развиваемые взамен оптической литографии новые групповые технологии получения рисунка с рекордным разрешением ≤ 10 нм. Технологии позволяют реализовать как получение маски для дальнейших технологических операций, так и функциональных структур.

Интеллектуальные нанотехнологические комплексы на базе сканирующей зондовой техники. Высоковакуумные комплексы, обеспечивающие локальную модификацию поверхности (фазового состава, потенциального и пространственного рельефа, структурной перестройки) в областях < 10 нм. Модификация осуществляется за счет полевых, механических и тепловых воздействий, а также за счет ввода реактивных сред непосредственно в область воздействия под зондом. Для повышения производительности необходимы многозондовые картриджи и устройства прецизионного многократного позиционирования (с точностью ≤ 2 нм).

Технологии самоорганизации и самосборки. При уменьшении размеров ≤ 10 нм создание упорядоченных структур и одиночных

структур традиционными методами становится труднореализуемой задачей. Особенно важны с этой точки зрения различные формообразующие структуры (полости), в которых можно создавать наноэлементы. Важную роль играют также технологии получения упорядоченных нанотрубок (особенно углеродных) и пористых мембран на основе оксида алюминия.

Технология получения рисунка на базе сканирующей зондовой микроскопии с разрешением 0,5...1 нм за счет использования в качестве зондов углеродных нанотрубок и прецизионных позиционеров.

Разработка элементной базы нано- и микроэлектромеханики. Наноэлементы для прямого преобразования электрической энергии в механическую с высокой эффективностью. Статические элементы на основе ориентированных пучков нанотрубок во много раз эффективнее пьезоэлектрических и могут работать, например, в физиологическом растворе. Динамические элементы на базе нанотрубок обеспечивают коммутацию в пикосекундном диапазоне. Однослойные нанотрубки с большим аспектным соотношением могут перемещаться в жидких средах за счет волнообразного движения. Все это открывает большие перспективы как для технических, так и для биомедицинских применений.

Заполнение нанополостей (в том числе нанотрубок) чужеродными атомами, молекулами, кластерами, фуллеренами позволяет изменять характеристики элементов, создавать одномерные кристаллы, хранить и доставлять определенные компоненты в нужное место для создания новых элементов с помощью зондовых технологий. Заполнение двумерных и трехмерных нанопористых сред позволяет создавать фотонные кристаллы – основу для оптических коммутирующих устройств «беспороговых» лазеров, сверхчувствительных фотоприемников. Большой интерес для медицины представляет прививка к нанотрубкам органических комплексов и ДНК.

Сверхчувствительные сенсоры без промежуточного преобразования энергии. Они могут быть созданы, поскольку частотный диапазон механических колебаний наноэлементов близок к вращательному и колебательному спектрам молекул.

Эффекты автоэмиссии, наряду с квантово-механическими эффектами, связанными с переносом зарядов, играют все большую роль в таких наноэлементах. Так, порог автоэмиссии для нанотрубок на несколько порядков ниже, чем в традиционных элементах. Это открывает возможности создания наноламп, скомбинированных с нанотранзисторами, что важно для устройств обработки информации, эксплуатирующихся в экстремальных условиях и условиях спецвоздействий.

Наноэлектромеханические приборы и системы. Наноэлектромеханические запоминающие устройства (ЗУ) терабитной емкости. Матричные многозондовые сканирующие устройства в сочетании с регулярными средами из наноэлементов позволяют создать терабитные ЗУ с плотностью до 10^2 Тбит/см², что необходимо для систем обработки информации новых поколений.

Микро- и нанооптоэлектромеханические системы. Управляемые микромеханические зеркальные отражатели и дифракционные решетки обеспечивают коммутацию и селекцию сигналов при беспроводной передаче данных, в системах управления оружием, микророботами и т. д. со скоростью передачи 10^{12} бит/с.

Микроробототехника. Создание микроустройств, способных передвигаться, собирать, хранить и передавать информацию, осуществлять определенные воздействия по заложенной программе или команде. Разработка микродвигателей, микронасосов, микроприводов.

Нано- и микроэлектромеханические датчики различных физических величин (ускорения, давления, температуры, влажности, изменения размеров, скорости протекания химических и физических процессов).

Гибкие плоские дисплеи и устройства отображения информации.

Важнейшие области применения. Такими областями применения нано- и микроэлектромеханических устройств и систем могут быть:

- информационные и компьютерные технологии;
- машиностроение;
- биология и медицина;
- наносистемы для вредных производств, ядерной энергетики;
- наносистемы для систем вооружения и космических систем.

Диагностика наноструктур. Современное развитие физики и технологии твердотельных наноструктур, проявляющееся в непрерывном переходе топологии элементов электронной техники от субмикронных размеров к нанометровой геометрии, потребовало разработки новых и усовершенствования существующих диагностических методов, а также создания новых образцов оборудования для анализа свойств и процессов в низкоразмерных системах, в наноматериалах и в искусственно создаваемых наноструктурах.

В этом плане особое внимание уделяется созданию и применению взаимодополняющих высокоразрешающих методов практической диагностики и характеристики наноструктур, обеспечивающих получение наиболее полной информации об основных физических, физико-

химических и геометрических параметрах наноструктур и протекающих в них процессов.

В настоящее время существует огромное число методов диагностики, еще больше методик исследования физических и физико-химических параметров и характеристик твердотельных и молекулярных структур. Вместе с тем получение наноструктур, низкоразмерных систем и новых наноструктурированных материалов с заданными свойствами, предназначенных для применения в современной электронике, ставит и новые диагностические задачи. Для решения современных задач диагностики наноструктур требуются адаптация к этим задачам традиционных методов (оборудования), а также развитие новых, прежде всего локальных (до масштабов 0,1 нм), методов исследования и анализа свойств и процессов, присущих объектам нанометровой геометрии и системам пониженной размерности.

Методы нанодиагностики должны быть по возможности неразрушающими и давать информацию не только о структурных свойствах нанообъектов, но и об их электронных свойствах с атомным разрешением. Для разработки нанотехнологий решающей оказывается также возможность контролировать атомные и электронные процессы *in situ* (на своем месте) с высоким временным разрешением, в идеале до времени, которое равно или меньше периода атомных колебаний (до 10^{-13} с и менее). Необходима также диагностика электронных, оптических, магнитных, механических и иных свойств нанообъектов на «наноскопическом» уровне. Невозможность полного удовлетворения этих требований приводит к использованию комплекса методов диагностики нанообъектов, среди которых необходимо выделить следующие основные группы методов:

- электронная микроскопия высокого разрешения, которая исторически явилась первым методом, реально обеспечивающим визуализацию структуры объектов с атомным разрешением. К этому методу примыкают различные модификации электронной микроскопии, обеспечивающие проведение химического анализа нанообъектов, исследования *in situ*, поверхностно-чувствительные методы, например отражательная электронная микроскопия, микроскопия медленных электронов и другие. Во многих случаях электронная микроскопия высокого разрешения является единственным источником получения информации о внутренней структуре и структуре границ раздела таких нанообъектов, как квантовые ямы и квантовые точки;

- методы электронной томографии для получения информации об объеме нанобъектов развиты;
- рентгендифракционные методы, особенно с использованием высокой светимости синхротронных источников, дают уникальную информацию об атомной структуре нанобъектов без их разрушения;
- методы электронной спектроскопии для химического анализа, оже-электронной спектроскопии, методы фотоэлектронной спектроскопии, рамановской и ИК-спектроскопии, метод фотолюминесценции, которые активно развиваются с повышением разрешающей способности, что делает эти методы весьма полезными при диагностике нанобъектов.

Дальнейшее развитие всевозможных методов диагностики (в частности, диагностики, встроенной в технологию), учитывающих специфику нанобъектов и их характерные размеры, является неотъемлемой частью развития высоких технологий получения и анализа свойств наноструктур нового поколения.

Зондовая сканирующая микроскопия. Появление наноструктур потребовало новых методов и средств, позволяющих изучать их свойства. Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) был создан в 1982 г. Он открыл широкие возможности научных и прикладных исследований в области нанотехники и стал первым техническим устройством, с помощью которого была осуществлена наглядная визуализация атомов и молекул. За создание сканирующего туннельного микроскопа Г. Бинниг совместно с Г. Рорером в 1986 г. были удостоены Нобелевской премии по физике. Сейчас известны десятки различных вариантов зондовой сканирующей микроскопии (SPM – *scanning probe microscopy*).

Общее у этих методов – наличие зонда (чаще всего это хорошо заостренная игла с радиусом при вершине ~ 10 нм) и сканирующего механизма, способного перемещать его над поверхностью образца в трех измерениях. Грубое позиционирование осуществляют трехкоординатными моторизованными столами. Тонкое сканирование реализуют с помощью трехкоординатных пьезоактюаторов, позволяющих перемещать иглу или образец с точностью в доли ангстрема на десятки микрометров по x и y и на единицы микрометров – по z . Все известные в настоящее время методы SPM можно условно разделить на три основные группы:

- сканирующая туннельная микроскопия; в ней между электропроводящим острием и образцом приложено небольшое напряжение ($\sim 0,01 \dots 10$ В) и регистрируется туннельный ток в зазоре, зависящий от свойств и расположения атомов на исследуемой поверхности образца;

- атомно-силовая микроскопия; в ней регистрируют изменения силы притяжения иглы к поверхности от точки к точке. Игла расположена на конце консольной балочки (кантилевера), имеющей известную жесткость и способной изгибаться под действием небольших вандерваальсовых сил, которые возникают между исследуемой поверхностью и кончиком остря. Деформацию кантилевера регистрируют по отклонению лазерного луча, падающего на его тыльную поверхность, или с помощью пьезорезистивного эффекта, возникающего в самом кантилевере при изгибе;
- ближнепольная оптическая микроскопия; в ней зондом служит оптический волновод (световолокно), сужающийся на том конце, который обращен к образцу, до диаметра меньше длины волны света. Световая волна при этом не выходит из волновода на большое расстояние, а лишь слегка «вываливается» из его кончика. На другом конце волновода установлены лазер и приемник отраженного от свободного торца света. При малом расстоянии между исследуемой поверхностью и кончиком зонда амплитуда и фаза отраженной световой волны меняются, что и служит сигналом, используемым при построении трехмерного изображения поверхности.

В лучших модификациях туннельной и атомно-силовой микроскопии удается обеспечить атомное разрешение, за которое пучковая электронная микроскопия боролась более полувека и сейчас достигает ее в крайне редких случаях (рис. 6.61). Размеры и стоимость зондовых микроскопов значительно ниже, чем у традиционных электронных, а возможностей даже больше: они могут работать при комнатной, повышенной и криогенной температуре, на воздухе, в вакууме и в жидкости, в условиях действия сильных магнитных и электрических полей, СВЧ- и оптического облучения, и т. п. Зондовыми методами можно исследовать самые разнообразные материалы – проводящие, диэлектрические, биологические и другие – без трудоемкой подготовки образцов.

Они могут использоваться для локального определения атомных конфигураций, магнитных, электрических, тепловых, химических и других свойств поверхности. Особенно интересны попытки зарегистрировать спин-зависимые явления, определяющие величину туннельного тока в зависимости от поляризации одного-единственного электрона в атоме на исследуемой поверхности. Это прямой путь к решению задач одноэлектроники и спинтроники.

Помимо исследовательских функций сканирующая туннельная микроскопия может выполнять еще и активные – обеспечивать захват отдельных атомов, перенос их в новую позицию, атомарную сборку проводников шириной в один атом, локальные химические реакции, манипулирование отдельными молекулами.

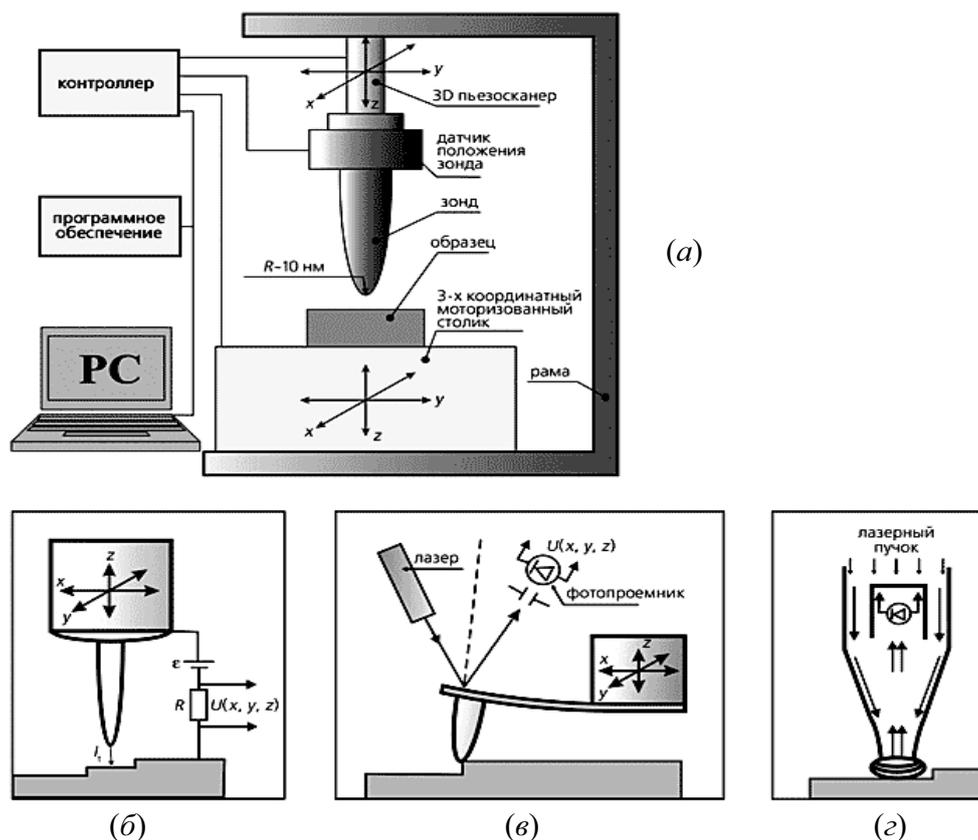


Рис. 6.61. Схема сканирующих зондовых методов исследования и модификации поверхности в нанотехнологии (а) и три основных типа приборов: б – туннельный микроскоп; в – атомно-силовой микроскоп; г – ближнепольный оптический микроскоп

Обычно используют два основных способа манипуляции атомами с помощью иглы – горизонтальный и вертикальный. Процесс вертикальной манипуляции отличается от горизонтальной тем, что после захвата нужный атом отрывают от поверхности, поднимая зонд на несколько ангстрем. Это, разумеется, требует больших усилий, чем «перекатывание» атома по поверхности, но зато потом процесс переноса не зависит от встречающихся на ней препятствий (ступеней, ям, адсорбированных атомов). Процесс отрыва атома от поверхности контролируют по скачку тока. После перемещения в необходимое место его «сбрасывают», приближая острие к поверхности и переключая напряжение на игле. В сущности, это пока лишь демонстрация возможности достижения теоретического предела в оперировании веществом при конструировании полезных человеку устройств. Осуществление атомных манипуляций в массовом масштабе, пригодном для производства, требует преодоления многих сложностей: необходимости криогенных температур и сверхвысокого вакуума, низкой производительности и надежности и т. д. (рис. 6.62).

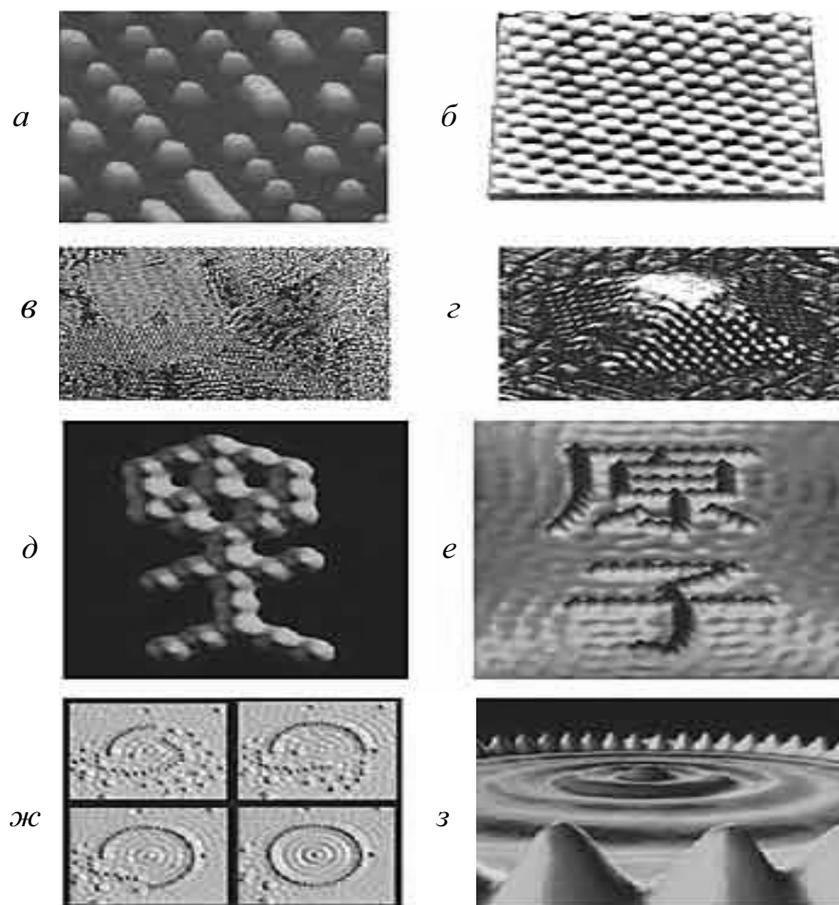


Рис. 6.62. Изображения различных объектов, полученных методами сканирующей зондовой микроскопии: атомно-силовой – рельеф CD-ROM (а); сканирующей туннельной – изображение поверхности графита с атомным разрешением (б); структура нанокристаллического палладия (в); изображение квантовой точки, образованной самосборкой атомов (германиевая пирамида – г). Атомный дизайн в сканирующем туннельном микроскопе: д – «пляшущий человек», выложенный молекулами монооксида углерода; е – иероглифы, выложенные атомами железа на поверхности меди (111); ж – поатомная сборка «квантового загона» для электрона из 48 атомов железа на поверхности кремния методом атомарного дизайна в SPM; з – в собранном «загоне» видны стоячие волны электронной плотности захваченного ловушкой электрона

Больших успехов зондовые методы достигли в нанолитографии – «рисовании» на поверхности различных наноструктур с характерными размерами в десятки нанометров. К практическим приложениям подошли процессы трех типов: химического окисления поверхности, индуцируемого движущимся острием; осаждения с острия nanoостровков металла на поверхность за счет скачка напряжения; контролируемого и наноцарапания. Минимальные размеры элементов, создаваемых этими способами, составляют около 10 нм. Это позволяет осуществлять очень плотную запись, но производительность и надежность метода требует его доработки.

Развитие зондовых методов в направлении силового нанотестинга поверхности дает возможность исследовать механические свойства тонких приповерхностных слоев в нанобъемах, атомные механизмы наноконтактной деформации при сухом трении, абразивном износе, механическом сплавлении и др.

Усовершенствование зондов для сканирующей микроскопии стимулировало поток публикаций о разработке и применении миниатюрных механических, химических, тепловых, оптических и других сенсоров для различных задач.

Кантилеверы (консольные балочки), создававшиеся первоначально для нужд атомно-силовой микроскопии, демонстрируют высокую чувствительность не только к приложенным силам, но и к химическим реакциям на поверхности, магнитному полю, теплу, свету. Массивы кантилеверов из кремния, получаемые хорошо разработанными в полупроводниковой промышленности технологиями и содержащие несколько десятков (а иногда и сотен) отдельных датчиков, позволяют реализовать на одном чипе функции «электронного носа» или «электронного языка» для химического анализа газов и жидкостей, воздуха, продуктов питания.

Так, разработан сенсор, представляющий собой кантилевер с химически «пришитой» биомолекулой на кончике острия. Эта молекула (например, антитело или фермент) может селективно вступать в химическое взаимодействие только с избранными веществами, которые могут находиться в многокомпонентном растворе. Захват определенной молекулы из раствора и связывание ее на кончике острия приводит к изменению резонансной частоты кантилевера на известную величину, что расценивается как доказательство присутствия детектируемых молекул в пробе. Чувствительность и избирательность таких сенсоров позволяет обнаруживать и регистрировать отдельные молекулы в растворе.

Зондовая техника обещает повысить плотность записи информации. Компания IBM финансирует проект «*Millipede*» (от лат. тысяченожка), возглавляемый одним из нобелевских лауреатов 1986 г. Г. Биннингом. Первоначально использовали модифицированный атомно-силовой микроскоп, который наносил на поверхность пластика отпечатки путем наноиндентирования. Для этого нужен жесткий и массивный кантилевер. Это делает процесс записи и считывания малопродуктивным. Для увеличения производительности предлагается использовать одновременно несколько тысяч кантилеверов, собранных в матрицу (опытный образец имеет 1024 острия, размещенных на площади 3×3 мм²). Каждый кантилевер имеет длину 70 мкм, ширину 10 мкм и толщину 0,5 мкм. На свободном конце кантилевера сформировано острие высотой 1,7 мкм и радиусом в вершине менее 20 нм. Для уменьшения требуе-

мых при наноиндентировании усилий, снижения массы кантилевера и увеличения стойкости острия последнее нагревают короткими импульсами тока до 300...400 °С, что локально размягчает пластиковую пленку, на которую записывается информация. В процессе доводки — матрица 64×64 острия на площади около 7 мм². Она имеет общую производительность несколько сотен мегабайт в секунду как при записи, так и при считывании. За несколько лет группа надеется преодолеть терабитный барьер (имеется в виду ~Тбайт/см²) и приблизиться к атомной плотности записи (~10³ Тбайт/см²).

Зондовые методы стали универсальным средством исследования, атомарного дизайна, проведения химических реакций между двумя выбранными атомами (молекулами), записи и хранения информации с предельно возможным в природе разрешением ~10⁻¹⁰ м (для атомарных структур), а также последующего ее считывания.

Что впереди? Дальнейшее развитие нанотехнологии предусматривает переход от отдельных элементов и их сборок к интегрированию сенсорной, логически-аналитической, двигательной и исполнительской функции в одном устройстве. Первый шаг в этом направлении — создание микронаноэлектромеханических систем (MEMS/NEMS). И наноострия, и нанокантилеверы, и просто нанопроводники могут быть очень чувствительными и селективными сенсорами, расположенными на одном чипе с электроникой. К ним можно добавить нанонососы, и в результате получится аналитическая химическая лаборатория, размещаемая на пластине площадью ~1 см². Существуют уже анализаторы боевых отравляющих веществ, биологического оружия, искусственный нос и искусственный язык для аттестации пищевых продуктов (вин, сыров, фруктов, овощей).

Министерство обороны США, например, финансирует программу создания «*Smart dust*» (умной пыли), т. е. большого семейства микророботов, размером в пылинку, которые смогут, рассыпавшись над территорией противника, проникать во все щели, каналы связи, создавать свою сеть, собирать и передавать оперативную информацию, проводить спецоперации и т. д.

Есть и более гуманистические проекты: создать специальные микророботы-«доктора», которые будут сочетать функции диагноста, терапевта и хирурга, перемещаясь по кровеносной, лимфатической или другой системе человека. Уже изготовлены образцы таких роботов, имеющих все функциональные узлы и размеры около 1 мм, и существует реальная перспектива уменьшения их размеров до микронного и субмикронного уровня.

Ключевые технологии и материалы всегда играли большую роль в истории цивилизации, выполняя не только узко производственные

функции, но и социальные. По мнению многих экспертов, XXI век будет веком нанонауки и нанотехнологий, которые и определяют его лицо. Воздействие нанотехнологий на жизнь обещает иметь всеобщий характер, изменить экономику и затронуть все стороны быта, работы, социальных отношений. С помощью нанотехнологий мы сможем экономить время, получать больше благ за меньшую цену, постоянно повышать уровень и качество жизни (рис. 6.63):

- наноэнергетика сделает мир более чистым в результате разработки новых типов двигателей, топливных элементов и транспортных средств;
- сформируется новая экономика, основанная на нанотехнологиях и нанопродуктах. Е-бизнес (электронно-информационный) уступит лидирующие позиции NT-бизнесу (нанотехнологическому);
- быстрое развитие нанопромышленности потребует коренной перестройки системы образования на всех уровнях;
- потребительские и промышленные товары станут более долговечными, качественными и компактными, а вместе с тем и более дешевыми;
- медицинское обслуживание будет более доступным и эффективным. Появятся новые лекарственные препараты и диагностические средства. Нанобиотехнология сделает жизнь людей более здоровой и продолжительной;
- новые, подключенные к Интернету устройства, объединяющие функции телефона, телевизора и компьютера, образуют глобальную систему связи, которая будет объединять всех, везде и всегда;
- мир окружающих вещей станет «интеллектуальным» за счет встраивания чипов во все предметы быта и производства;
- общество станет более свободным и интеллектуальным.

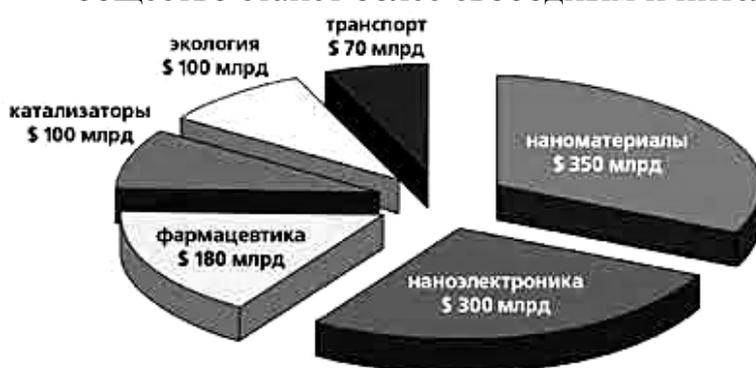


Рис. 6.63. Прогноз развития рынка продукции нанотехнологии на 2015 г.

Мы все будем вовлечены в эти процессы. Вопрос заключается в том, будем ли мы только потребителями этих благ или созидателями, т. е. будем ли мы за них только платить или зарабатывать на нанотехнологиях.

Основные выводы

В кристаллах с ковалентной связью облака валентных электронов имеют форму «лепестков», связывающих соседние ядра. При металлической связи такой локализации электронных облаков нет — волновые функции валентных электронов расплываются по всему металлу. Максимальная кинетическая энергия электронов проводимости описывается выражением:

$$\varepsilon_F = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{3}{\pi} n \right)^{2/3},$$

где n — число атомов в единице объема. Величина ε_F называется энергией Ферми. Электроны проводимости находятся в потенциальной яме, средняя глубина которой равна U_0 . Работа выхода — $W_0 = |U_0| - \varepsilon_F$.

Если имеется цепочка из n одинаковых атомов, расположенных через равные промежутки, то энергетический уровень отдельного атома расщепляется и образует зону из близко расположенных энергетических уровней. В случае металлической связи зона, отвечающая основному состоянию валентных электронов, либо не полностью заполнена, либо перекрывается с незаполненной зоной, отвечающей уровню с более высокой энергией.

Валентная зона полупроводников заполнена полностью и отделена запрещенной зоной (энергетической щелью) от следующей незаполненной зоны (называемой зоной проводимости). Число термически возбужденных валентных электронов, попадающих в зону проводимости, пропорционально $\exp(-E_g/kT)$. Легирование полупроводника приводит к тому, что в нем могут образовываться избыточные электроны либо электроны проводимости (полупроводник n -типа), либо дырки (полупроводник p -типа). При создании контакта между полупроводниками p - и n -типа образуется p - n -переход. Если к этому переходу приложить внешнее напряжение V , то через переход потечет ток:

$$I = I_0 \cdot [\exp(eV/kT) - 1].$$

Прибор, называемый p - n - p транзистором, можно рассматривать как p - n -переход (эмиттер—база) с коллектором p -типа, присоединенным к базе. В этом случае малый ток в цепи базы I_b позволяет управлять большим током коллектора I_c . При этом коэффициент усиления по току $\beta = I_c/I_b$ может достигать ~ 100 .

Электроны проводимости можно извлекать с поверхности холодного металла, приложив сильное электрическое поле. Это явление называется автоэлектронной эмиссией и его можно объяснить туннельным проникновением электронов сквозь потенциальный барьер, при котором волновая функция электрона экспоненциально затухает внутри барьера.

Упражнения

1. Глубина потенциальной ямы металла составляет 11 эВ, а работа выхода — 4 эВ.
 - а) Найдите полную энергию электронов на уровне Ферми.
 - б) На сколько увеличивается кинетическая энергия электрона при его проникновении в металл?
2. Сколько электронов проводимости приходится на 1 г натрия? Сколько электронов проводимости в 1 г германия, легированного мышьяком в пропорции три части мышьяка на миллион частей германия?
3. Электрон с кинетической энергией 3 эВ попадает в металл; при этом его кинетическая энергия увеличивается до 8 эВ. Какова глубина потенциальной ямы?
4. Интенсивность солнечного излучения на орбите Земли (солнечная постоянная) равна 1370 Вт/м². Какой должна быть площадь солнечной батареи с КПД = 15 %, чтобы создать источник тока мощностью 100 Вт?
5. Рассмотрим воображаемый металл *M*. При поглощении металлом фотонов с энергией 7 эВ испускаются фотоэлектроны с энергией 3 эВ. Плотность электронов проводимости такова, что внутри металла они имеют кинетические энергии вплоть до 5 эВ. Найдите:
 - а) положение уровня Ферми; б) работу выхода; в) глубину потенциальной ямы; г) кинетическую энергию, которую теряет электрон, вылетая с поверхности металла; д) порог фотоэффекта (в эВ).
6. Сосуд диаметром 1 см содержит гелий II, причем высота столба жидкости равна 5 см. Через сколько времени после удаления крышки вытечет вся жидкость? Скорость вытекания — 50 см/с, толщина пленки 10⁻⁵ см. Испарением жидкости пренебречь.
7. В некотором металле потенциал сил притяжения электронов равен U_0 . Вне металла длина волны электрона равна 10 Å, а в металле она уменьшается до 4 Å. Каково значение U_0 (в эВ)?
8. Повторите решение в примере п. 6.5, с. 226 для германия.
9. Повторите решение в примере п. 6.5, с. 232 в случае, когда напряжение равно 1 В.
10. Повторите решение в примере п. 6.5, с. 232 для $t = 100$ °С.
11. Какой должна быть ширина запрещенной зоны полупроводника, из которого изготовлен светодиод, светящийся зеленым светом ($\lambda = 500$ нм)?
12. Считая, что мозг человека содержит 10¹⁰ нейронов, оцените приближенную толщину интегральной схемы, в которой плотность размещения твердотельных элементов соизмерима с плотностью нейронов в мозге.

Задачи

1. Если в кристаллической решетке атом удерживается силой, пропорциональной его смещению, то по какому закону будет увеличиваться среднее смещение с температурой? Считая коэффициент упругости равным \aleph , найдите выражение для среднеквадратичного смещения атома через \aleph , T и другие необходимые величины.
2. Вычислите плотность состояний ρ в фазовом пространстве (элемент этого пространства записывается в виде $dx dy dz dp_x dp_y dp_z$). Величина ρ определяется формулой $dn = \rho dx dy dz dp_x dp_y dp_z$.

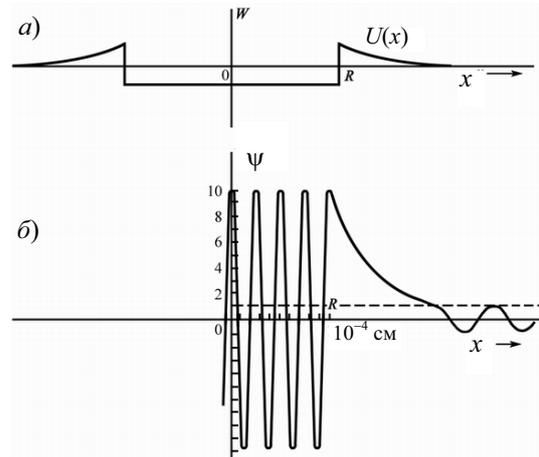
Указание:
$$\int_0^{p_F} dp_x dp_y dp_z = \int_0^{p_F} 4\pi p^2 dp = \frac{4}{3}\pi p_F^3.$$

3. Если для свободных электронов в белом карлике справедливо соотношение $p_F = mc$, то чему равно отношение $\langle K \rangle / \varepsilon_F$? Здесь следует воспользоваться точным выражением для кинетической энергии $K = \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4} - mc^2$.
4. Используя рис. 6.8, найдите, при каком расстоянии между атомами натрия становится проводником. Чему равна соответствующая плотность вещества?
5. Масса Солнца $2,0 \cdot 10^{30}$ кг. Допустим, что оно неожиданно сжалось в сферу диаметром 5 км, имеющую однородную плотность.
 - а) Считая число протонов, нейтронов и электронов одинаковым, определите максимальную кинетическую энергию электрона и нейтрона (в эВ). Чему равна полная кинетическая энергия всех частиц (в Дж)?
 - б) Чему будет равна полная кинетическая энергия, если протоны и электроны превратятся в нейтроны?
6. В литии работа выхода равна 2,36 эВ, а плотность лития 534 кг/м^3 . Вычислите глубину потенциальной ямы U_0 .
7. Если бы величина U_0 на рис. 6.6, а оказалась бесконечно большой, то чему были бы равны E_1 и E_2 , записанные через $\hbar^2/(mx_0^2)$? Сравните полученную величину со значением, приведенным на этом рисунке.
8. С помощью изложенного в гл. 3 метода определения уровней энергии найдите E_1 (рис. 6.6, в) в потенциальной яме конечных размеров.
9. Во сколько раз возрастет сопротивление цилиндра из чистого германия, если его температуру понизить с 300 до 30 К?
10. Какое количество примеси мышьяка потребуется для того, чтобы удвоить электропроводность легированного им германия? В чи-

стом германии число электронов проводимости можно считать равным $\exp(-E_g/2kT)$.

11. Повторите решение в примере п. 6.4, с. 220 для случая, когда цепочка составлена не из 100, а из 200 прямоугольных ям. Все остальные величины прежние. Чему будет равна энергия первого, пятидесятого, сотого и двухсотого энергетического уровня?

12. Предположим, что потенциальная энергия взаимодействия электрона с отрицательно заряженным шариком радиусом 10^{-6} м изменяется так, как показано на рис. а. Волновая функция электрона внутри шарика приведена на рис. б. Найдите: а) длину волны электрона внутри шарика;



б) скорость электрона внутри шарика; в) вероятность вылета электрона наружу при каждом соударении с поверхностью; г) среднее время жизни электрона до вылета из шарика при отсутствии потерь энергии.

13. В небольшом холодном катоде 10^{18} электронов каждую секунду сталкиваются с поверхностью, ограничивающей область большого электрического поля. При прохождении через барьер волновая функция электрона ослабляется в 10^3 раз. Найдите величину тока автоэлектронной эмиссии в амперах.
14. Плотность состояний ферми-газа равна $n = (8\pi/3) \cdot (p_F/h)^3$. Найдите выражение для среднего импульса $\langle p \rangle$ через граничный импульс p_F .
15. Выведите формулу для ε_F в двумерном пространстве. В этом случае n представляет собой число частиц на единицу площади.
16. Повторите решение предыдущей задачи для ультрарелятивистских частиц.

Учебное издание

ТЮРИН Юрий Иванович
ЧЕРНОВ Иван Петрович
КРЮЧКОВ Юрий Юрьевич

ФИЗИКА

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Учебник

Редактор	<i>А.В. Высоцкая</i>
Компьютерная верстка	<i>О.Ю. Аршинова</i>
Дизайн обложки	<i>О.Ю. Аршинова</i>
	<i>О.А. Дмитриев</i>

Подписано к печати 02.11.2009. Формат 60x84/16. Бумага «Снегурочка».
Печать XEROX. Усл. печ. л. 18,61. Уч.-изд. л. 16,83.
Заказ 1336-09. Тираж 200 экз.



Томский политехнический университет
Система менеджмента качества
Томского политехнического университета сертифицирована
NATIONAL QUALITY ASSURANCE по стандарту ISO 9001:2008



ИЗДАТЕЛЬСТВО  ТПУ . 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30. Тел./факс: 8(3822) 56-35-35, www.tpu.ru